

Elektronendynamik und Phasendiagramme in Vielteilchen-Modellen des Magnetismus

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium
im Fach Physik

eingereicht an der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I
Humboldt-Universität zu Berlin

von
Dipl.-Phys. Sören Henning

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:
Prof. Dr. Jan-Hendrik Olbertz

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät I:
Prof. Dr. Stefan Hecht

Gutachter:

1. Prof. Dr. W. Nolting
2. Prof. Dr. M. Potthoff
3. PD Dr. A. Saenz

eingereicht am: 9.04.2013

Tag der mündlichen Prüfung: 16.08.2013

Abstract

The first part of this work deals with the Kondo-lattice model. The stationary Schrödinger equation is solved for the case of one electron in a ferromagnetically saturated local moment system (the magnetic polaron). The complete eigensystem is derived for the finite and infinite lattice. The time-dependent Schrödinger equation is then solved for arbitrary initial conditions and a detailed analysis of the down-electron decay dynamics is given. For finite band occupations the magnetic ground-state phase diagram is constructed within a mean-field theory. The effect of disorder/dilution in the local moment system on the phase diagram is discussed.

The second part concentrates on the investigation of the Hubbard model. A nonlocal self-energy is derived within a modified perturbation theory that interpolates between weak and strong Coulomb repulsion. Results for the spectral density and quasiparticle density of states are shown with special attention to the effects of nonlocal correlations. Results for the optical conductivity within a renormalized one-loop approximation are also discussed. The main result of this section is the importance of nonlocal correlations for the fulfillment of the Mermin-Wagner theorem. A phase diagram that shows regions of ferromagnetic order is calculated for the simple cubic lattice.

Zusammenfassung

Der erste Teil dieser Arbeit ist dem Kondogittermodell gewidmet. Für ein Elektron, das in einen ferromagnetisch gesättigten Hintergrund aus lokalen Spinmomenten eingebracht wird (ferromagnetisches Polaron), wird die stationäre Schrödingergleichung gelöst und das vollständige Eigenwertspektrum im endlichen und unendlichen Gitter abgeleitet. Danach wird die zeitabhängige Schrödingergleichung für beliebige Anfangsbedingungen gelöst und eine detaillierte Analyse des Down-Elektron-Zerfalls vorgenommen.

Für endliche Bandfüllungen wird im Anschluss das magnetische Grundzustandsphasendiagramm mit Hilfe einer Molekularfeldtheorie bestimmt. Der Einfluss von Verdünnung/Unordnung im lokalen Momentensystem auf die auftretenden Phasen wird analysiert.

Im zweiten Teil der Arbeit wird das Hubbardmodell untersucht. Für dieses wird mit Hilfe einer modifizierten Störungstheorie (englisch: modified perturbation theory, MPT) eine wellenzahlabhängige (nicht-lokale) Selbstenergie abgeleitet, die sowohl für schwache als auch für starke Coulombwechselwirkungen gute Ergebnisse liefert. Mit dieser werden dann Spektraldichten und Quasiteilchenzustandsdichten berechnet, wobei insbesondere die nicht-lokalen Korrelationseffekte im Fokus stehen. Daneben werden Ergebnisse für die optische Leitfähigkeit, die in einer renormierten diagrammatischen Ein-Schleifen-Näherung berechnet wurden, besprochen. Es wird dann gezeigt, dass nur unter Beachtung der nicht-lokalen Korrelationseffekte ein ferromagnetisches Phasendiagramm konstruiert werden kann, das in Einklang mit dem Mermin-Wagner-Theorem steht.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Das Kondogittermodell	5
2.1	Einleitung	5
2.2	Das magnetische Polaron	7
2.2.1	Einleitung	7
2.2.2	Die elektronische Greenfunktion	9
2.2.3	Das endliche Gitter	12
2.2.4	Das unendliche ausgedehnte Gitter	18
2.2.5	Dynamik des Down-Elektron-Zerfalls	24
2.3	Phasendiagramme	32
2.3.1	Modellerweiterungen zur Beschreibung magnetischer Phasen	32
2.3.2	Das verdünnte, ungeordnete Spinsystem	35
2.3.3	Ergebnisse für das unverdünnte System	40
2.3.4	Ergebnisse für das verdünnte System	42
3	Das Hubbardmodell	45
3.1	Einleitung	45
3.2	Grundlagen – exakte Aussagen	48
3.2.1	Das Mermin-Wagner-Theorem	48
3.2.2	Das unendlich schmale Band	50
3.2.3	Der Bereich starker Kopplung und schmaler Bandbreite . . .	52
3.2.4	Spektrale Eigenschaften im Bereich starker Kopplung	55
3.2.5	Das unendlichdimensionale Gitter	60
3.3	Näherungsverfahren	65
3.3.1	Der Spektraldichteansatz	65
3.3.2	Störungstheorie zweiter Ordnung	67
3.3.3	Modifizierte Störungstheorie	74
3.4	Thermodynamische Größen	78
3.4.1	Statische paramagnetische Suszeptibilität	78
3.4.2	Die optische Leitfähigkeit	78
3.5	Resultate	82
3.5.1	Vergleich der Näherungsverfahren	83
3.5.2	Spektrale Eigenschaften des dreidimensionalen Hubbardmodells	84
3.5.3	Spektrale Eigenschaften des zweidimensionalen Hubbardmodells	87
3.5.4	Leitfähigkeit	93
3.5.5	Die inverse paramagnetische Suszeptibilität und der ferroma- gnetische Phasenübergang	93

Allgemeine mathematische Beziehungen	97
1 Fouriertransformationen	97
1.1 Zeit-/Energiedarstellung	97
1.2 Elektronische Operatoren	97
1.3 Spinoperatoren	97
2 Kommutatoren/Antikommutatoren	98
2.1 Spinoperatoren	98
2.2 Die Lie'sche Entwicklungsformel	98
Greenfunktionen	99
3 Definitionen	99
4 Die Greenfunktion freier Elektronen	100
4.1 Analytische Fortsetzung der freien (lokalen) Greenfunktion	100
5 Bewegungsgleichung und Selbstenergie	105
6 Spektralmomente	107
Nachträge zu einzelnen Kapiteln	109
7 Zum magnetischen Polaron	109
7.1 Bewegungsgleichung der Greenfunktion	109
7.2 Spektralmomente	109
7.3 Restterm der Streuzustände	110
7.4 Koeffizienten der Langzeitentwicklung	111
8 Hubbardmodell	111
8.1 (Anti-)Kommutatoren zur Berechnung der Spektralmomente nach Harris und Lange	111
8.2 Spektralmomente	112
8.3 Gitterzustandsdichten	113
8.4 Rothmethode	115
8.5 Die Ozaki-Pol-Summation	119
8.6 Die statische paramagnetische Suszeptibilität	121

„[T]hen he [Uhlenbeck] said to me [Goudsmit]: "But don't you see what this implies? It means that there is a fourth degree of freedom for the electron. It means that the electron has a spin, that it rotates". [...] I asked him: "What is a degree of freedom?"“

1 Einleitung

(S.A. Goudsmit: *The discovery of the electron spin*)

Das Phänomen des Magnetismus beschäftigt die Menschheit seit der Antike [12]. Die Aufklärung der mikroskopischen Ursachen dieses Phänomens konnte jedoch sinnvoll erst in Angriff genommen werden, nachdem die Grundlagen der Quantenmechanik als Theorie der kleinsten Bausteine der Materie gelegt waren.

Insbesondere das im Jahre 1925 durch G. E. Uhlenbeck und S. Goudsmit erfolgte Postulat des Eigendrehimpulses als neue Eigenschaft der Elektronen [146, 147] stellt die Grundvoraussetzung einer jeden mikroskopischen Theorie dar. Uhlenbeck und Goudsmit führten den Spin der Elektronen ein, um unter anderem das Aufspalten bestimmter Spektrallinien im Magnetfeld (Zeemaneffekt) erklären zu können. Dazu war es nötig, der neuen Teilcheneigenschaft Spin die Drehimpulsquantenzahl $S = \frac{1}{2}$ sowie einen anormalen Landé-Faktor $g_S = 2$ zuzuordnen. Theoretisch begründet wurde der Spin durch die relativistische Theorie des Elektrons von P.A.M. Dirac [25]. In dieser Theorie folgt der Spin mit dem richtigen Landé-Faktor aus der Linearisierung der Wellengleichung eines relativistischen Spin-0 Teilchens (Klein-Gordon-Gleichung) ohne weiteres Zutun. Es ist allerdings eine bis heute nicht immer beachtete Tatsache, dass man den Spin des Elektrons inklusive des korrekten Landé-Faktors auch aus der nichtrelativistischen Schrödingergleichung durch Linearisierung ableiten kann [81, 41].

Im Jahre 1928, kurz nach der Entdeckung des Elektronenspins, veröffentlichte Heisenberg seine Theorie des Ferromagnetismus [47]. Diese stellt im Wesentlichen eine Anwendung des Heitler-London'schen Verfahrens zur Erklärung der Bindung im Wasserstoffmolekül auf einen mehratomigen Kristall dar. Die klassisch nicht erklärable Austauschwechselwirkung, die aus der Coulombwechselwirkung und dem Pauliprinzip resultiert, führt dann zu einer effektiven Wechselwirkung zwischen Elektronenspins an verschiedenen Atomrümpfen. Heisenbergs Theorie gab damit zum ersten Mal eine quantenmechanische Begründung des in der Theorie von P. Weiss [157] noch ad hoc eingeführten molekularen Feldes zur Erklärung der Ausrichtung der Elementarmagnete.

Allgemein bezeichnet man heute ein Modell, bei dem an verschiedenen Gitterplätzen \mathbf{R}_i lokalisierte Spins über einen Austauschterm der Form

$$\mathcal{H}_H = - \sum_{ij} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \hat{\mathbf{S}}_j \quad (1.1)$$

im Hamiltonoperator miteinander wechselwirken, als Heisenbergmodell. Bei den Spinoperatoren muss es sich nicht zwangsläufig um den Elektronenspin handeln, sondern es sind auch effektive Spinmomente mit höheren Spinquantenzahlen S denkbar, wie sie z.B. durch Kopplung von Spins einzelner Elektronen in teilweise gefüllten, inneren Elektronenorbitalen nach den Hund'schen Regeln entstehen können. Auch die Ursachen der Wechselwirkung können vielfältig sein. So kann die Wechselwirkung beispielsweise über ein diamagnetisches Zwischenatom (Superaustausch) oder

1 Einleitung

über freie Elektronen (RKKY) vermittelt werden [103]. In diesem Sinne ist das Heisenbergmodell als ein effektives Modell aufzufassen und der konkrete Austauschmechanismus schlägt sich nur indirekt in den Kopplungskonstanten J_{ij} nieder.

Mit Hilfe des Heisenbergmodells können, oft unter Verwendung von weiteren Zusatztermen wie Anisotropie- oder Feldtermen, eine ganze Reihe von magnetischen Phänomenen quantitativ gut erklärt werden. So gelang zum Beispiel in [134, 76, 78] mit einem erweiterten Heisenbergmodell eine exzellente theoretische Deutung von Ferromagnetische-Resonanz-Experimenten an dünnen Kobalt- und Nickel-Filmen. In [126, 125] konnte durch Abbildung auf ein effektives Heisenbergmodell eine sehr gute Abschätzung der Curietemperatur von Gadolinium nahe am experimentell bestimmten Wert gewonnen werden.

Ein Grund für die weite Verbreitung des Heisenbergmodells ist sicher auch, dass zu seiner Lösung mittlerweile ausgefeilte Techniken zur Verfügung stehen. Eindimensionale Ketten können heute praktisch numerisch exakt mit Hilfe der Dichtematrixrenormierungsgruppe-Methode (DMRG) gelöst werden [160, 130]. Für höherdimensionale Gitter gibt es im Fall einer ferromagnetischen Austauschkopplung ($J_{ij} > 0$) sehr gute approximative Verfahren zur Lösung des Vielteilchenproblems [133, 112]. Darüber hinaus existieren zumindest für das zweidimensionale System auch zunehmend numerisch exakte Verfahren wie die Quanten-Monte-Carlo-Methode der stochastischen Reihenentwicklung [123, 4]. Letztere wurde in [52] genutzt, um eine approximative Theorie zur Beschreibung von dünnen magnetischen Filmen im Grenzfall einer ferromagnetischen Monolage zu testen.

Trotz dieser unbestreitbaren Vorzüge und Erfolge des Heisenbergmodells muss dieses doch in mindestens zweierlei Hinsicht als unbefriedigend bezeichnet werden. Erstens ist ein Modell mit lokalisierten Spins sicher nicht in der Lage, metallischen Ferromagnetismus, wie er in Cobalt, Eisen und Nickel auftritt, zu erklären, da ein Modell für diese Metalle den itineranten Charakter der Elektronen mit berücksichtigen muss. Zweitens stellt das Heisenbergmodell selbst in Materialien, wo ein solches permanentes lokales magnetisches Moment existiert, etwa durch das Vorhandensein von nur teilweise gefüllten, inneren Elektronenorbitalen, allenfalls ein effektives Modell dar, da die Natur der Austauschwechselwirkung im Dunkeln bleibt.

Letzterer Fall liegt beispielsweise in dem ferromagnetischen Metall Gadolinium vor, bei dem die lokalen magnetischen Momente von den partiell gefüllten $4f$ -Schalen herrühren, die zu einem Gesamtspinmoment von $S = 7/2$ koppeln. Die lokalen Momente polarisieren dann die sie umgebenden Leitungselektronen, was zu einer indirekten Kopplung der lokalen Momente und damit letztendlich zu ferromagnetischer Ordnung führt. Bei den ferromagnetischen Halbleitern EuO und EuS liegt eine andere Situation vor. Bei tiefen Temperaturen¹ ordnen die lokalen magnetischen Momente, die von den halbgefüllten $4f$ -Schalen des Europiums gebildet werden, über einen speziellen Superaustauschmechanismus [80]. Bei Temperaturen unterhalb T_C existieren praktisch keine Ladungsträger in den Leitungsbändern dieser Materialien und sie stellen somit Isolatoren dar. In diesem Sinne handelt es sich bei EuO und EuS um ideale Heisenberg-Ferromagnete. Allerdings zeigen optische Absorptionsexperimente [15], dass unterhalb der Curietemperatur eine Rotverschiebung der Absorptionskante für elektronische Übergänge der Art $4f \rightarrow (5d, 6s)$ (EuO) von den

¹Die Curietemperaturen dieser Stoffe liegen bei: $T_C = 69,33\text{K}$ in EuO und $T_C = 16,57\text{K}$ in EuS [135, 98]

lokalisierten $4f$ -Niveaus in das Leitungsband stattfindet. Dies deutet auf starke Korrelationen zwischen den lokalisierten $4f$ -Zuständen und den Leitungsbandzuständen hin und die elektronische Quasiteilchenzustandsdichte (der Leitungselektronen) sollte deshalb eine starke Abhängigkeit vom magnetischen Zustand der $4f$ -Niveaus und damit auch eine starke Temperaturabhängigkeit aufweisen [104].

Sowohl die durch itinerante Elektronen vermittelte Wechselwirkung in Gadolinium als auch die Rotverschiebung der optischen Absorptionskante in den Europiumchalkogeniden kann theoretisch durch das Kondogittermodell (englisch: Kondo lattice model (KLM)) beschrieben werden [126, 104]. In diesem Modell interagieren freie Leitungselektronen mit den lokalen magnetischen Momenten über eine heisenbergartige Austauschwechselwirkung. Dabei entspricht die Situation in den ferromagnetischen Halbleitern (bei $T = 0\text{K}$) gerade einem der wenigen nichttrivialen, exakt lösbaren Grenzfälle des KLM – dem ferromagnetischen Polaron [88, 64, 136]. Dieser Grenzfall beschreibt die Eigenschaften eines Elektrons, das in einen ferromagnetisch gesättigten Hintergrund aus lokalisierten Spins in das ansonsten leere Leitungsband eingebracht wird. Obwohl die Lösbarkeit dieser Situation seit langem bekannt ist, steht eine vollständige Analyse seiner Eigenschaften meines Wissens bis heute aus. Dies verwundert etwas, lassen sich doch hieran schon hochinteressante Vielteilcheneffekte, wie z.B. der Zerfall und die Formation von Quasiteilchen, in allen Details untersuchen. Diese Forschungslücke will der erste Teil der vorliegenden Arbeit schließen. Teile dieser Untersuchung wurden vorab in [53] veröffentlicht. Bei endlicher Bandfüllung können die Elektronen im KLM eine indirekte Wechselwirkung zwischen den lokalen magnetischen Momenten hervorrufen. Eine störungstheoretische Untersuchung zeigt [103], dass diese Wechselwirkung, die in der Literatur als RKKY-Wechselwirkung² bezeichnet wird, langreichweitig und oszillatorisch ist. Auf Grund der Vorzeichenwechsel in den Austauschkonstanten sind dann, als Funktion der Bandfüllung und der lokalen Austauschkopplung, eine Vielzahl von magnetischen Phasen als Grundzustand des KLM denkbar. Im zweiten Teil des Kapitels zum KLM wird aus einer endlichen Menge von magnetischen Phasen durch Vergleich der inneren Energie das magnetische Grundzustandsphasendiagramm des KLM bestimmt. Ergebnisse dieses Teils wurden, ebenfalls vorab, in [50, 140] publiziert.

In den metallischen Ferromagneten, bei denen dieselbe Elektronengruppe für die elektrische Leitfähigkeit verantwortlich ist und die magnetische Ordnung hervorbringt, erwartet man ein kompliziertes Zusammenspiel von kinetischer Energie, spinunabhängiger Coulombwechselwirkung und Pauliprinzip als Ursache der kollektiven ferromagnetischen Ordnung. Das Hubbardmodell, das unabhängig von J. Hubbard [63], M. C. Gutzwiller [44] und J. Kanamori [71] im Jahre 1963 vorgeschlagen wurde, stellt ein minimales Modell zum Studium dieser Aspekte dar.

Trotz der einfachen Gestalt des Modellhamiltonoperators ist es bis heute nicht gelungen, eine geschlossene, für alle Parameterbereiche dieses Modells gültige Lösung des Vielteilchenproblems aufzufinden. Insbesondere im Bereich starker Coulombabstoßung und einer Bandfüllung ungleich des halbgefüllten Bandes, für den man metallischen Ferromagnetismus erwartet, existiert keine systematische Theorie [152, 102]. Eine wichtige Rolle beim Auffinden einer Theorie des Ferromagnetismus im Hub-

²RKKY steht für Ruderman, Kittel, Kasuya und Yoshida, die in ihren Arbeiten die Theorie dieser Wechselwirkung ausgearbeitet haben.

1 Einleitung

bardmodell spielen darum die wenigen exakt bekannten Aussagen, die man für das Hubbardmodell beweisen kann und mit denen dann approximative Lösungen getestet werden können.

Das Mermin-Wagner-Theorem [87, 154, 39] schließt eine ferromagnetische (und auch antiferromagnetische) Ordnung für ein- und zweidimensionale Gitter aus. Eine solche Aussage hatte sich für das Heisenbergmodell schon aus der Arbeit zur Spinwellentheorie von F. Bloch [10] aus dem Jahre 1930 ergeben, in der auch das bekannte Bloch'sche $T^{3/2}$ -Gesetz für das Verhalten der Magnetisierung bei tiefen Temperaturen abgeleitet wurde. Es existiert also eine untere Grenze in der Gitterdimensionalität, für die spontaner Magnetismus im Hubbardmodell nicht ausgeschlossen werden kann.

Andererseits ist die Existenz von ferromagnetischer Ordnung im Hubbardmodell im Grenzfall eines unendlichdimensionalen Gitters mittlerweile zweifelsfrei belegt [106, 148, 164]. Dieses Ergebnis konnte abgeleitet werden, nachdem W. Metzner und D. Vollhardt [89] gezeigt hatten, dass die Selbstenergie im Grenzfall unendlicher Gitterdimension eine lokale Größe darstellt und somit keine Wellenzahlabhängigkeit aufweist. Wenig später wurde dann von A. Georges und G. Kotliar die dynamische Molekularfeldtheorie (englisch: dynamical mean field theory (DMFT)) entwickelt [37], die eine exakte Abbildung des unendlichdimensionalen Hubbardmodells auf ein Impurity-Problem beinhaltet, für dessen Lösung effiziente (numerische) Verfahren zur Verfügung stehen. Für endlichdimensionale Gitter gilt die (lokale) DMFT aber nur noch approximativ, da mit sinkender Koordinationszahl des Gitters nicht-lokale Korrelationseffekte zunehmen. So konnten H. Schweitzer und G. Czycholl in [132] mit einer nichtlokalen, störungstheoretischen Selbstenergie zeigen, dass gerade beim Übergang vom dreidimensionalen zum zweidimensionalen Gitter eine deutliche Zunahme von nichtlokalen Korrelationseffekten in der Spektraldichte des Hubbardmodells insbesondere am Fermi-niveau zu beobachten ist. Es kann darum vermutet werden, dass eine Theorie für Ferromagnetismus im Hubbardmodell, die insbesondere mit dem Mermin-Wagner-Theorem in Einklang steht, die Wellenzahlabhängigkeit der Selbstenergie mit in Betracht ziehen muss.

Im zweiten Hauptteil dieser Arbeit soll eine approximative, nichtlokale Theorie für das Hubbardmodell entwickelt werden. Die wesentliche Aussage dieser Theorie wird darin bestehen, dass die nichtlokalen Korrelationen eine ferromagnetischen Ordnung im zweidimensionalen Gitter in der Tat verhindern. Für das dreidimensionale Gitter wird dann das ferromagnetische Phasendiagramm konstruiert, wobei sich auch in diesem Fall ein starker Einfluß der Wellenzahlabhängigkeit der Selbstenergie zeigt. Die Ergebnisse des Kapitels zum Hubbardmodell wurden teilweise vorab in [51] veröffentlicht.

2 Das Kondogittermodell

2.1 Einleitung

Das Kondogittermodell (englisch: Kondo lattice model (KLM)) ist das grundlegende Modell, um die Wechselwirkung freier Ladungsträger mit lokalen, magnetischen Momenten, die durch unvollständig gefüllte, innere Schalen der beteiligten Atome hervorgerufen werden, zu beschreiben.

Eine solche Situation liegt zum Beispiel bei Gadolinium vor [126], in dem die halb gefüllten, atomaren 4f-Niveaus ein effektives, lokales magnetisches Moment von $S = \frac{7}{2}$ hervorrufen. Dieses wechselwirkt über eine ferromagnetische, heisenbergartige lokale Austauschwechselwirkung mit itineranten 5d/6s-Elektronen. Die freien Elektronen vermitteln eine indirekte Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida Wechselwirkung (RKKY) [119, 74, 163] zwischen den lokalisierten Spins, die zu Ferromagnetismus mit einer bemerkenswert hohen Curie-Temperatur von $T_C = 293.2$ K führt [97]. Eine weitere prototypische Stoffklasse stellen die Europium-Chalkogenide EuO und EuS dar [88, 98, 153]. Bei diesen Verbindungen handelt es sich um ferromagnetische Halbleiter, d.h. es befinden sich bei tiefen Temperaturen keine oder nur wenige Ladungsträger im Leitungsband und das lokale Momentensystem ordnet ferromagnetisch. In [104, 11] wurde das KLM in Verbindung mit einer spinpolarisierten Dichtefunktionaltheorie (DFT), die einen realistischen Input für die Leitungsbanddispersionen lieferte, benutzt, um die spinaufgelöste Quasiteilchenzustandsdichte (englisch: quasiparticle density of states (QDOS)) von EuO und EuS zurechnen. Die QDOS steht in direkter Verbindung zu einem Photoemissionsexperiment und liefert dessen nackte Linienform [101]. Das KLM wurde weiterhin genutzt, um Aspekte der Physik der Manganate [48, 121, 138, 139], deren lokale magnetischen Momente aus den Kristallfeld-aufgespaltenen 5d-Orbitalen des Mn stammen, und der verdünnten magnetischen (III,Mn)V Halbleiter (englisch: diluted magnetic semiconductors (DMS)) [107, 3, 68] theoretisch zu beschreiben. Ein wichtiger Vertreter der DMS ist $Ga_{1-x}Mn_xAs$, bei dem ein geringer Prozentsatz der Galliumionen durch Mangan ersetzt wird. Das Mangan wirkt dann auf zweifache Weise. Zum einen bilden die 5d-Elektronen ein permanentes magnetisches Moment der Spinquantenzahl $S = \frac{3}{2}$, zum andern wirkt Mangan in $GaAs$ als Akzeptor und steuert ein Loch im Valenzband bei. Die Löcher können dann eine indirekte Wechselwirkung zwischen den Mn -Spins hervorrufen und so ferromagnetische Ordnung induzieren. Mit den derzeitigen experimentellen Präparationstechniken erreicht man eine Curie-Temperatur von $T_C \approx 173$ K [67]. Zum Abschluss dieser Aufzählung seien noch die Schwere-Fermionen-Systeme genannt, zu denen z.B. die Ceriumverbindungen $CeCu_6$, $CeAl_3$ und die Uranverbindungen UBe_{13} , UPt_3 gehören. In diesen Verbindungen ist der lineare Term der spezifischen Wärme bei tiefen Temperaturen im Vergleich zum freien Elektronengas teilweise um das Tausendfache erhöht. Die Physik der schweren Fermionen kann zum Teil durch ein Kondogittermodell mit lokaler, antiferromagne-

2 Das Kondogittermodell

tischer Wechselwirkung verstanden werden [57, 21].

Wir werden uns in dieser Arbeit mit einem minimalen Modell für die Wechselwirkung zwischen frei beweglichen Elektronen und an den Gitterplätzen lokalisierten magnetischen Momenten beschäftigen. Die elektronische Bandstruktur soll im Rahmen einer Ein-Band-Tight-Binding-Näherung beschrieben werden. Die lokalisierten Momente, die von inneren, partiell gefüllten atomaren Niveaus stammen, sollen eine lokale heisenbergartige (Kontakt-) Wechselwirkung mit den Elektronenspins erfahren. Eine solche Form der Wechselwirkung kann ganz allgemein aus dem intra-atomaren Coulombwechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators abgeleitet werden [103]. Der untersuchte Modellhamiltonoperator hat die folgende Gestalt:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{i\sigma} \left(z_{\sigma} S_i^z c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + S_i^{\sigma} c_{i-\sigma}^+ c_{i\sigma} \right) \quad (2.1)$$

$$\stackrel{\mathcal{F}}{=} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{J}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}\sigma} \left(z_{\sigma} S_{\mathbf{q}}^z c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} + S_{\mathbf{q}}^{\sigma} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma}^+ c_{\mathbf{k}\sigma} \right), \quad (2.2)$$

wobei sowohl die Ortsraum- (2.1) als auch die Wellenzahldarstellung (2.2) angegeben ist. Die hier benutzte Konvention der Fouriertransformation der Operatoren kann dem Anhangskapitel 1 entnommen werden. Die $c_{i\sigma}^+/c_{i\sigma}$ bezeichnen die Erzeugungs-/ Vernichtungsoperatoren eines Elektrons am Gitterplatz \mathbf{R}_i mit Spinprojektion σ . Der Operator $S_i^{\sigma} = S_i^x + i z_{\sigma} S_i^y$ bezeichnet den Aufsteige- ($z_{\uparrow} = 1$) bzw. Absteigeoperator ($z_{\downarrow} = -1$) des lokalen Spinnmoments. Die Reichweite des Hoppingintegrals t_{ij} soll im Folgenden stets auf nächste Nachbarn beschränkt bleiben und für diese einen konstanten (isotropen) Wert annehmen. Dieser ist so gewählt, dass sich für die Breite W des freien Bandes $W = 1$ eV ergibt. Der Bandschwerpunkt wird durchweg $t_{ii} = 0$ gesetzt.

Der eben vorgestellte KLM-Hamiltonoperator konstituiert ein kompliziertes Vielteilchen-Problem, das im Allgemeinen nicht exakt lösbar ist und zu dessen Analyse Approximationen unverzichtbar erscheinen. Es existiert aber ein nichttrivialer, exakt lösbarer Grenzfall des Modells, das magnetische Polaron. Diesen Grenzfall werden wir zunächst einer ausführlichen Analyse unterziehen.

Danach wollen wir das Grundzustandsphasendiagramm der magnetischen Konfigurationen des KLM bestimmen, wobei wir dafür auf Näherungsverfahren angewiesen sein werden.

2.2 Das magnetische Polaron

2.2.1 Einleitung

Es ist schon seit langem bekannt [88, 116, 64], dass das KLM einen exakt lösbaeren, nichttrivialen Grenzfall besitzt - das (ferro-)magnetische Polaron. Dieser Grenzfall beschreibt die Situation, in der ein Elektron in das sonst leere Leitungsband und einen ferromagnetisch gesättigten Hintergrund ($\langle S_i^z \rangle = S$) eingebracht wird. Handelt es sich dabei um ein Up-Elektron, so wird dieses sich weiterhin wie ein freies (Gitter-)Elektron bewegen, da es im ohnehin schon gesättigten System der lokalen Momente keinen Streupartner findet. Lediglich seine Energie ist um einen konstanten Wert verschoben. Ein Down-Elektron kann hingegen an einem lokalen Moment streuen und dabei seinen Spin umdrehen, also zu einem Up-Elektron werden. Dieser Prozess kann aber auch rückgängig gemacht werden, da nach dem Spinumklapp eine Spindeviation (Magnon) im lokalen Momentensystem existiert. Diese einfache Überlegung zeigt bereits, dass man für ein Down-Elektron mit interessanten Effekten rechnen kann. Bevor wir unsere Untersuchung beginnen, soll ein Überblick über die Literatur zu diesem Thema gegeben werden.

In der Arbeit von Shastry und Mattis [136] wird mit Hilfe der retardierten Ein-Elektronen-Greenfunktion (EGF) eine detaillierte Analyse des Quasiteilchenspektrums gegeben. Diese Analyse wurde von Berciu und Sawatzky [7] auf komplexere Gitter und langreichweitigere Austauschwechselwirkungen ausgedehnt. Allgemein erlaubt die Kenntnis der EGF die Berechnung der Spektraldichte, die die nackte Linienform eines Photoemissionsexperiments liefert. Diese Stärke des Greenfunktionszugangs zur Lösung von Vielteilchen-Problemen hat den Nachteil, dass die Information über die Eigenzustände des zugrundeliegenden Ein-Elektron-Quantensystems nur indirekt zugänglich ist.

Aus diesem Grund wurde in anderen Arbeiten die Schrödingergleichung als Ausgangspunkt der Betrachtung gewählt, da diese eine direkte Berechnung der Eigenzustände erlaubt [88, 64, 136, 99]. Sigrist et. al. [137] haben auf Grundlage einer Analyse der Eigenzustände bewiesen, dass der Grundzustand eines Systems mit antiferromagnetischer Austauschwechselwirkung einen nicht vollständig polarisierten Hintergrund aus lokalisierten Spins besitzt.

Wegen der unzweifelhaften Wichtigkeit der genauen Kenntnis des Eigenwertspektrums eines der wenigen, exakt lösbaeren Grenzfälle eines Vielteilchen-Modellsystems erscheint es verwunderlich, dass keine der genannten Arbeiten ein vollständiges Bild der Eigenzustände des endlichen Systems mit N Gitterplätzen liefert. Diese Forschungslücke soll hier geschlossen werden.

Im Limes des unendlich ausgedehnten Gitters $N \rightarrow \infty$ wird die freie Dispersion des Elektrons eine kontinuierliche Funktion des Wellenzahlvektors. In seinen grundlegenden Arbeiten zur Störungstheorie in Systemen mit kontinuierlichem Spektrum [61, 62] stellte L. Van Hove fest, dass in solchen Systemen der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators zu persistenten Effekten führt, die nicht durch eine streutheoretische Behandlung erfasst werden können. Diese Selbstenergieeffekte können einerseits dissipativer Natur sein, d.h. es treten Lebensdauereffekte auf (Zerfall von Quasiteilchen), andererseits können sogenannte Wolkeneffekte (englisch: cloud effects) auftreten (Bildung eines neuen Quasiteilchens mit unendlich langer Lebensdauer). Wir werden sehen, dass beide Effekte beim magnetischen Polaron eine Rolle

spielen.

Das Phänomen zerfallender (Quasiteilchen-)Zustände in der Quantenmechanik hat das Interesse zahlreicher Physiker geweckt und es gibt eine Vielzahl von Arbeiten zu diesem Thema. Weit entfernt davon, eine vollständige Aufzählung dieser zu liefern, möchte ich im Folgenden diejenigen Arbeiten nennen, die mich zu der vorliegenden Untersuchung des magnetischen Polarons inspiriert haben.

Nakanishi hat in einer grundlegenden Arbeit [96] eine erweiterte Quantentheorie vorgeschlagen, die komplexe Eigenwerte des Hamiltonoperators enthält. Die komplexen Eigenwerte können dann mit einem instabilen Teilchen assoziiert werden. Um zu komplexen Eigenwerten zu gelangen, die ja auf den ersten Blick der Hermitezität des Hamiltonoperators widersprechen, betrachtete Nakanishi die analytische Fortsetzung des Propagators des Teilchens über das kontinuierliche Spektrum hinweg und fand in dieser eine Polstelle. Durch die Definition einer komplexen Deltafunktion (englisch: complex distribution) war er in der Lage, einen neuen Eigenzustand des Hamiltonoperators zu konstruieren, dessen komplexer Eigenwert der Position der Polstelle entspricht, und der ein in der Zeit exponentiell zerfallendes Teilchen beschreibt. Der Trick Nakanishis besteht nicht in der Änderung der eigentlichen Hilbertraumbasis des Quantensystems, sondern in der formalen Erweiterung der (kontinuierlich vom Wellenzahlvektor abhängenden) Koeffizienten der Hilbertraumzustände mittels der komplexen Deltafunktion¹. Die Arbeit von Nakanishi stellt allerdings bei Weitem nicht den ersten Versuch dar, Zustände mit komplexer Eigenenergie zu konstruieren. Gamow führte bereits 1928 Zustände mit komplexer Energie ein, um den α -Zerfall eines radioaktiven Nuklids zu beschreiben [33, 23].

Die Annahme eines exponentiellen Teilchenzerfalls in einem Quantensystem stellt allenfalls eine Näherung dar, denn es kann unter sehr allgemeinen Voraussetzungen gezeigt werden [144], dass es sowohl für kleine Zeiten (Teilchen wurde präpariert) als auch für große Zeiten Abweichungen von einem exponentiellen Zerfallsgesetz gibt. Die Abweichungen für große Zeiten hängen eng damit zusammen, dass das Spektrum des Hamiltonoperators nach unten beschränkt ist. Dies und die Rolle der Van Hove-Singularität am unteren Ende des Spektrums wurden von Höhler [60] und Khalin [75] diskutiert. Die Abweichungen bei kleinen Zeiten und der resultierende Quanten-Zeno-Effekt werden in [91, 20] besprochen.

Die Ideen von Nakanishi wurden von Sudarshan et. al. erweitert [143] und die Theorie des instabilen Teilchens wurde in mathematisch strengerer Form im Rahmen eines erweiterten Hilbertraum-Formalismus (englisch: rigged Hilbert space) abgeleitet [110, 142].

Zur Veranschaulichung der in den genannten Arbeiten erarbeiteten Methoden zur Beschreibung eines zerfallenden Teilchens wird in diesen häufig ein sehr einfaches Modell des Zwei-Teilchenzerfalls herangezogen, das Friedrichs-Lee-Modell [30, 79, 40]. Dieses beschreibt zwei neutrale Fermionenfelder V und N , die über ein skalares Bosonenfeld, Θ miteinander wechselwirken. Der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators erlaubt Übergänge der Form $V \leftrightarrow N + \Theta$. Für bestimmte Parameterkonstellationen zerfällt dann das V -Teilchen in der Zeit vollständig [40].

In dieser Arbeit werde ich die Methoden der oben genannten Arbeiten auf das Festkörperproblem des magnetischen Polarons anwenden, um ein tieferes Verständnis der Zerfallsdynamik eines Down-Elektrons zu erlangen.

¹Für eine tiefergehende Diskussion dieses Punktes siehe auch [24].

2.2.2 Die elektronische Greenfunktion

An dieser Stelle wollen wir die wesentlichen Ergebnisse zum magnetischen Polaron, wie sie sich aus der Theorie der Greenfunktionen ergeben, zusammenstellen, um später auf sie verweisen zu können.

Die Bewegungsgleichung der elektronischen Greenfunktion des Kondogittermodells (191)² enthält höhere Greenfunktionen, die eine Lösung der Gleichung im allgemeinen Fall verhindern. Im Grenzfall des magnetischen Polarons ist die thermodynamische Mittelung in der Definition der Greenfunktionen (149) lediglich im trivialen Unterraum des Hilbertraumes, bestehend aus dem Elektronen- und Magnonen-Vakuumzustand:

$$|\Phi_{\text{vac}}\rangle = |0, 0\rangle, \quad (2.3)$$

durchzuführen. Dies kann ausgenutzt werden, um die höheren Greenfunktionen zu vereinfachen. So ergibt sich für die sogenannte Isingfunktion:

$$\langle\langle S_i^z c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle \rightarrow S \langle\langle c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle. \quad (2.4)$$

Um für die Spinflipfunktion zu einem geschlossenen Ausdruck³ zu kommen, müssen wir in der Bewegungsgleichungshierarchie eine Stufe höher gehen und erhalten:

$$\langle\langle S_i^{-\sigma} c_{i-\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle = \delta_{\sigma,\downarrow} \frac{JSG_{ii}^{(0)}(E - z_\sigma \frac{JS}{2})}{1 - \frac{J}{2}G_{ii}^{(0)}(E - z_\sigma \frac{JS}{2})} G_{ij\sigma}(E). \quad (2.5)$$

$G_{ii}^{(0)}(E)$ bezeichnet die lokale Greenfunktion freier Elektronen (157).

Betrachten wir zunächst das Up-Elektronenspektrum. Für die Greenfunktion ergibt sich in diesem Fall:

$$G_{\mathbf{k}\uparrow}(E) = G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E + \frac{JS}{2}) = \frac{1}{E + i0^+ + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2}}. \quad (2.6)$$

Ein Up-Elektron verhält sich also im Wesentlichen wie ein freies Elektron, dessen Energie auf Grund der Wechselwirkung mit den ferromagnetisch gesättigten, lokalen Momenten um den Molekularfeldwert verschoben ist. Es gibt keinerlei Selbstenergieeffekte (z.B. eine endliche Lebensdauer), da das Elektron keinen Partner für einen Spinumklapp-Prozess findet.

Eine ganz andere Situation findet sich für ein Down-Elektron. Setzt man (2.4) und (2.5) in (191) ein und transformiert das Resultat in den \mathbf{k} -Raum, so ergibt sich für die Down-Elektron-Greenfunktion:

$$G_{\mathbf{k}\downarrow}(E) = \frac{1}{E + i0^+ + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\downarrow}(E)}, \quad (2.7)$$

mit der elektronischen Selbstenergie:

$$\Sigma_{\downarrow}(E) = \frac{JS}{2} \left(1 + \frac{JG^{(0)}(E + \frac{JS}{2})}{1 - \frac{J}{2}G^{(0)}(E + \frac{JS}{2})} \right). \quad (2.8)$$

²Die in Klammern gesetzten Zahlen ohne Punkt bezeichnen nummerierte Formeln aus dem Anhang.

³„Geschlossener Ausdruck“ bedeutet hier, dass nur bereits bekannte Greenfunktionen vorkommen.

2 Das Kondogittermodell

Der Bandschwerpunkt, der durch das erste Spektralmoment⁴ gegeben ist, entspricht der Molekularfeldenergie des Down-Elektrons:

$$E_{\text{BS}} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2}. \quad (2.9)$$

Auf Grund der nun möglichen Spinumklapp-Prozesse erwartet man Lebensdauer-effekte der Quasiteilchen. In der Tat hat die Selbstenergie (2.8) einen endlichen Imaginärteil im Energiebereich des Up-Elektron-Spektrums. Es ist deshalb damit zu rechnen, dass Quasiteilchenzustände, die in diesem Energiebereich liegen, eine endliche Lebensdauer besitzen. Diese Zustände werden als *Streuzustände* bezeichnet.

Um Gleichung (2.9) für den Bandschwerpunkt zu erfüllen, muss es zumindest für genügend große $|J|$ ⁵ noch Quasiteilchenzustände oberhalb ($J > 0$) oder unterhalb ($J < 0$) der Streuzustände geben. Diese Zustände haben eine unendliche Lebensdauer, da die Selbstenergie außerhalb der Streuzustände reell ist⁶. Es wird später gezeigt werden, dass es genau einen solchen Zustand mit unendlicher Lebensdauer gibt, der in der Literatur als *gebundener Zustand* oder auch *Polaron-Zustand* bezeichnet wird.

In Abbildung 2.1 ist die Down-Elektron-Spektraldichte und die Quasiteilchenzustandsdichte für zwei Werte der Kopplungsstärke J gezeigt. Bei genügend großem J ($J = 0.3$ eV, obere Abbildung) sind die gebundenen Zustände komplett von den Streuzuständen separiert und bilden ein Polaronband. Entwickelt man den Nenner der Down-Elektron-Greenfunktion (2.7) für große $|J| \gg 1$ (und $|E| \gg 1$, wobei J und E dasselbe Vorzeichen haben mögen), erhält man eine näherungsweise gültige Bestimmungsgleichung für die Polaronenergie:

$$E_{\mathbf{k}}^{(p)} = \frac{2S}{2S+1} \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{J}{2}(S+1) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{J}\right). \quad (2.10)$$

Man kann an dieser Gleichung ablesen, dass der Bandschwerpunkt des Polaronbandes für große $|J|$ bei $E_{\text{BS}}^{(p)} \approx \frac{J}{2}(S+1)$ liegt und dass die Bandbreite des Polaronbandes in diesem Limes um den Faktor $\frac{2S}{1+2S}$ reduziert ist.

Wenn $|J|$ klein ist ($J = 0.1$ eV, untere Abbildung) tauchen Teile des Polaronbandes in die Streuzustände ein. Man erkennt in diesem Bereich immer noch eine ausgeprägte Polarondispersion, jetzt aber mit einer endlichen Linienbreite. Dies deutet auf eine endliche Lebensdauer des Quasiteilchens hin. Wir werden später zeigen, dass die Quasiteilchenpeaks im Bereich der Streuzustände mit Polstellen in der analytischen Fortsetzung des Down-Elektron-Propagators korrespondieren. Diese Polstellen liefern einen exponentiellen Beitrag zur Zerfallsdynamik des Down-Elektron-Quasiteilchens. Die Polarondispersion ist im Bereich der Van Hove-Singularitäten (horizontale, gestrichelte Linien in Abbildung 2.1) sichtbar gestört. Die besondere Rolle der Van Hove-Singularitäten als Verzweigungs-/ Grenzpunkte der analytischen

⁴Die Definition der Spektralmomente der retardierten Greenfunktion ist in Anhang 6 gegeben.

⁵Ein hinreichendes Kriterium wäre, dass der Bandschwerpunkt außerhalb der Streuzustände liegt.

⁶Ein endlicher Imaginärteil kann in (2.8) nur in dem Bereich vorkommen, in dem auch die freien Greenfunktionen zu den verschobenen Energieargumenten einen endlichen Imaginärteil (freie Zustandsdichte) haben. Dies ist aber wegen Gleichung (2.6) lediglich im Bereich der Up-Zustände und damit auch der Down-Streuzustände der Fall.

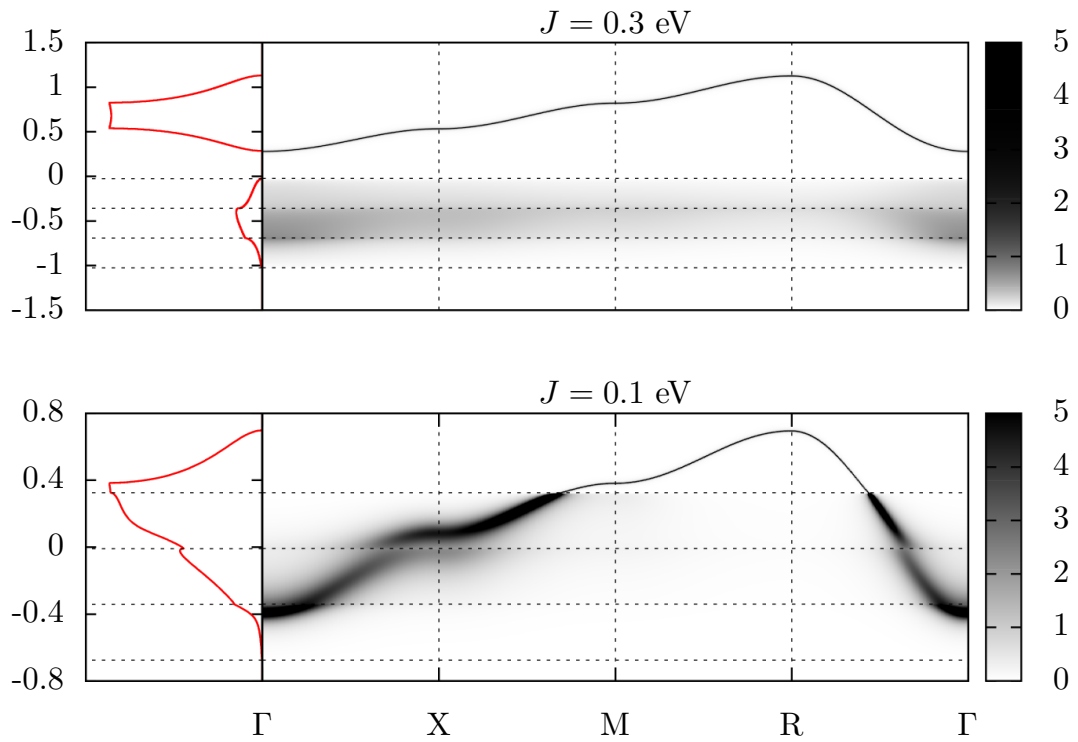


Abbildung 2.1: Spektraldichte des Down-Elektrons für zwei Kopplungsstärken J aufgetragen entlang von Richtungen hoher Symmetrie im \mathbf{k} -Raum. Die integrierte Quasiteilchenzustandsdichte ist ebenfalls abgebildet (rote Linie). Parameter: $S = 3.5$, $W = 1$ eV.

Fortsetzung wird ebenfalls an späterer Stelle herausgearbeitet werden.

2.2.3 Das endliche Gitter

Eigenzustände

Die Ein-Elektronen-Hilbertraum-Zustände, bestehend aus dem Produktzustand eines Elektronenzustands mit Wellenzahl \mathbf{k} und Spin σ und dem Magnonenvakuumzustand (alle lokalen Momente sind vollständig parallel ausgerichtet):

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^+ |\Phi_{\text{vac}}\rangle = |\mathbf{k}\sigma; 0\rangle \quad (2.11)$$

und dem Produktzustand eines Up-Elektronenzustands mit Wellenzahl \mathbf{k} und dem Ein-Magnonen-Zustand mit Wellenzahl \mathbf{q} :

$$\frac{1}{\sqrt{2S}} S_{\mathbf{q}}^- c_{\mathbf{k}\uparrow}^+ |\Phi_{\text{vac}}\rangle = |\mathbf{k}\uparrow; \mathbf{q}\rangle, \quad (2.12)$$

spannen einen Unterraum auf, der abgeschlossen bezüglich der Wirkung des Hamiltonoperators (2.2) ist. Zusätzlich kommutiert der Hamiltonoperator mit der z-Komponente des Gesamtspinoperators: $\hat{S}_{\text{tot}}^z = \sum_i (S_i^z + \frac{1}{2} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \hat{n}_{i\sigma})$. Man kann deshalb die Eigenzustände nach den Eigenwerten dieses Operators klassifizieren. Des Weiteren ist wegen Translationssymmetrie⁷ die äußere Wellenzahl \mathbf{k} erhalten.

Betrachten wir zunächst den ($S_{\text{tot}}^z = NS + \frac{1}{2}$) Sektor des Hilbertraums. Die Eigenzustände sind die Zustände mit maximaler Spin-Projektion:

$$\mathcal{H}|\mathbf{k}\uparrow; 0\rangle = \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{JS}{2} \right) |\mathbf{k}\uparrow; 0\rangle. \quad (2.13)$$

Ein interessanteres Bild ergibt sich im ($S_{\text{tot}}^z = NS - \frac{1}{2}$) Sektor. Einen allgemeinen Ansatz für Eigenzustände mit dieser z-Projektion stellt:

$$|\Phi_{\mathbf{k}}\rangle = \mathcal{N} \left\{ \alpha_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\downarrow; 0\rangle + \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} |\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow; \mathbf{q}\rangle \right\} \quad (2.14)$$

mit dem offensichtlichen Normierungsfaktor: $\mathcal{N} = 1/\sqrt{|\alpha_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{q}} |\beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}|^2}$ dar. Setzt man diesen Ansatz in die stationäre Schrödingergleichung ein, ergibt sich das folgende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} 0 &= \left(E - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{JS}{2} \right) \alpha_{\mathbf{k}} + J \sqrt{\frac{S}{2N}} \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}, \\ 0 &= \left(E - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \frac{JS}{2} \right) \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + J \sqrt{\frac{S}{2N}} \alpha_{\mathbf{k}} - \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (2.15)$$

⁷Im endlichen System erfordert dies periodische Randbedingungen.

für die Koeffizienten in (2.14). Definiert man:

$$E_0 = E - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{JS}{2}, \quad (2.16)$$

$$E_{n \neq 0} = E - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_n} + \frac{JS}{2}, \quad (2.17)$$

wobei \mathbf{q}_n die N Wellenzahlvektoren der ersten Brillouinzone durchläuft, so ergeben sich die Eigenwerte als Nullstellen der Determinante der Koeffizientenmatrix:

$$\begin{pmatrix} E_0 & J\sqrt{\frac{S}{2N}} & J\sqrt{\frac{S}{2N}} & J\sqrt{\frac{S}{2N}} & \cdots \\ J\sqrt{\frac{S}{2N}} & E_1 - \frac{J}{2N} & -\frac{J}{2N} & -\frac{J}{2N} & \cdots \\ J\sqrt{\frac{S}{2N}} & -\frac{J}{2N} & E_2 - \frac{J}{2N} & -\frac{J}{2N} & \cdots \\ J\sqrt{\frac{S}{2N}} & -\frac{J}{2N} & -\frac{J}{2N} & E_3 - \frac{J}{2N} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.18)$$

Um diese zu berechnen, zieht man am besten aus der ersten Spalte den Faktor $\sqrt{2SN}$ heraus und addiert das Ergebnis zu allen anderen Spalten hinzu. Danach kann man die Determinante durch Entwicklung nach der ersten Spalte gut auswerten.

Die resultierende Eigenwertgleichung hat die bemerkenswert einfache Gestalt:

$$0 = \left(\prod_{n=1}^N E_n \right) \left(E_0 - \frac{J}{2}(E_0 + JS) \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \frac{1}{E_m} \right). \quad (2.19)$$

Die Bandenergien $\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ zu verschiedenen \mathbf{q} sind aus Symmetriegründen nicht alle verschieden voneinander. Wir sammeln zunächst alle $\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}$ gleichen Werts in Gruppen, wobei der numerische Wert der Gruppenmitglieder mit $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(n)}$ bezeichnet wird und die zugehörigen \mathbf{q} -Werte mit $\mathbf{q}_l^{(n)}$, wobei l über alle Mitglieder der Gruppe läuft. Es soll die Konvention $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} = \epsilon_{\mathbf{k}}$ gelten. Mögen N_G solche Gruppen existieren, deren jeweiliger Entartungsgrad g_n sei. Dann können wir mit der Definition $F_n = E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(n)} + \frac{JS}{2}$ die Eigenwertgleichung (2.19) umschreiben zu:

$$0 = \left(\prod_{n=1}^{N_G} F_n^{g_n} \right) \left(E_0 - F_1 \frac{J}{2N} \sum_{m=1}^{N_G} \frac{g_m}{F_m} \right). \quad (2.20)$$

Das erste Produkt liefert N_G unterschiedliche Eigenwerte:

$$E_{\mathbf{k}}^{(n)} = \epsilon_{\mathbf{k}}^{(n)} - \frac{JS}{2} \quad (2.21)$$

mit der jeweiligen Vielfachheit $g_n - 1$, da wir im zweiten Faktor von (2.20) noch durch F_n ($n > 1$) teilen. Lediglich $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$ hat die volle Vielfachheit g_1 .

Wir wollen jetzt die Eigenvektoren zu den Eigenwerten (2.21) konstruieren. Dazu bemerken wir zunächst, dass die Eigenwerte gleich den Eigenwerten der reinen Up-Elektron-Zustände (2.11) aus dem $S_{\text{tot}}^z = NS + \frac{1}{2}$ Sektor des Hilbertraums sind. Es liegt darum nahe, dass die gesuchten Eigenzustände ebenfalls Up-Elektronen-(plus Magnon-) Zustände sind. Setzen wir in (2.14) versuchsweise $\alpha_{\mathbf{k}} = 0$ und $\beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \neq 0$ nur

2 Das Kondogittermodell

für $\mathbf{q} \in \{\mathbf{q}_l^{(n)}\}$, so ergibt sich aus (2.15) die folgende Bedingung für die Koeffizienten:

$$\sum_{\mathbf{q} \in \{\mathbf{q}_l^{(n)}\}} \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} = 0. \quad (2.22)$$

Diese Bedingung kann nichttrivial erfüllt werden, wenn man die $\beta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}$ als passend normierte Potenzen der g_n -ten Einheitswurzeln wählt⁸. Damit finden wir für die Eigenzustände:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^{n,m}\rangle = \frac{1}{\sqrt{g_n}} \sum_{l=0}^{g_n-1} e^{i\frac{2\pi}{g_n}ml} |\mathbf{k} - \mathbf{q}_l^{(n)} \uparrow; \mathbf{q}_l^{(n)}\rangle, \quad (2.25)$$

wobei $m \in 1 \dots g_n - 1$ die Eigenzustände des Unterraums mit Eigenenergie $E_{\mathbf{k}}^{(n)}$ durchnummeriert.

Es fehlt noch ein Eigenzustand zu dem Eigenwert $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$, da dieser die volle Vielfachheit g_1 hat. Dieser fehlende Zustand wird eine Down-Elektron-Komponente besitzen, da sich kein weiterer Up-Elektron-Zustand mit Magnon, der orthogonal zu allen Zuständen (2.25) wäre, konstruieren lässt. Setzen wir $E_{\mathbf{k}}^{(1)}$ in (2.15) ein, so erhalten wir nach kurzer Rechnung:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^{1,0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2NS}{g_1}}} \left(|\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle + \frac{\sqrt{2NS}}{g_1} \sum_{l=0}^{g_1-1} |\mathbf{k} - \mathbf{q}_l^{(1)} \uparrow; \mathbf{q}_l^{(1)}\rangle \right) \quad (2.26)$$

für den gesuchten Eigenzustand.

Bisher haben wir $1 + \sum_{l=1}^{N_G} (g_l - 1) = 1 + N - N_G$ Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren gefunden. Die fehlenden N_G Eigenwerte stammen aus dem zweiten Faktor in (2.20):

$$0 = E_0 - F_1 \frac{J}{2N} \sum_{l=1}^{N_G} \frac{g_l}{F_l} \quad (2.27)$$

$$= E - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{J}{2} \left(S + 1 + \frac{1}{N} \sum_{l=2}^{N_G} \frac{g_l (\epsilon_{\mathbf{k}}^{(l)} - \epsilon_{\mathbf{k}})}{E - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(l)} + \frac{JS}{2}} \right). \quad (2.28)$$

Diese Gleichung hat $N_G - 1$ Nulldurchgänge zwischen den Up-Elektron-Energien (2.21) und einen weiteren oberhalb ($J > 0$) oder unterhalb ($J < 0$) der Streuzustände. Für große $|J|$ liegt diese Nullstelle näherungsweise bei $E^{(p)} \approx \frac{J}{2}(S + 1)$ (siehe auch Gleichung (2.10)). In Abbildung 2.2 ist dies für einen Satz von Beispielparametern dargestellt. Das Umschreiben der Gleichung (2.27) ergibt eine implizite

⁸Als n -te Einheitswurzeln werden die Lösungen der Gleichung

$$\xi^n = 1 \quad (2.23)$$

bezeichnet. Im Körper \mathbb{C} der komplexen Zahlen sind das gerade die Zahlen:

$$\xi_k^{(n)} = \exp\left(i\frac{2\pi k}{n}\right); \quad k = 0, \dots, n-1. \quad (2.24)$$

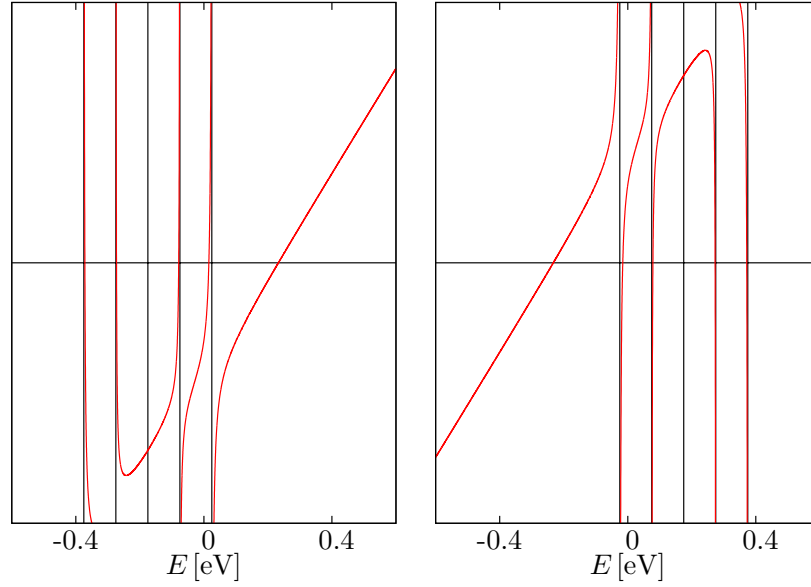


Abbildung 2.2: Darstellung der Eigenwertgleichung (2.27) für positives (linke Seite) und negatives (rechte Seite) J . Parameter: $|J| = 0.1$ eV, $S = 3.5$, $\epsilon_{\mathbf{k}} = 0$ eV, $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(1)} = -0.2$ eV, $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(2)} = -0.1$ eV, $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(3)} = 0.1$ eV, $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(4)} = 0.2$ eV, $g_n = 1$.

Bestimmungsgleichung für die (Polaron)-Eigenenergien:

$$E_{\mathbf{k}}^{p,(n)} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{J}{2} \left(S + 1 + \Phi_{\mathbf{k}}(E_{\mathbf{k}}^{p,(n)}) + \frac{JS}{2} \right) \quad (2.29)$$

mit

$$\Phi_{\mathbf{k}}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{z - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}. \quad (2.30)$$

Setzt man diese Eigenwertgleichung wiederum in das Gleichungssystem (2.15) ein, so erhält man die zugehörigen Eigenzustände:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}^{p,(n)}\rangle = \mathcal{N} \left(|\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2NS}} \sum_{\mathbf{q}} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^{p,(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \frac{JS}{2}} \right) |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle \right) \quad (2.31)$$

mit dem Normierungsfaktor

$$\mathcal{N} = \left(1 + \frac{1}{2NS} \sum_{\mathbf{q}} \left| 1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{E_{\mathbf{k}}^{p,(n)} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \frac{JS}{2}} \right|^2 \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.32)$$

Zeitentwicklung im endlichen System

Im letzten Abschnitt haben wir das Eigenwertproblem des magnetischen Polarons für ein endliches Gitter mit N Plätzen vollständig gelöst. Damit können wir jetzt

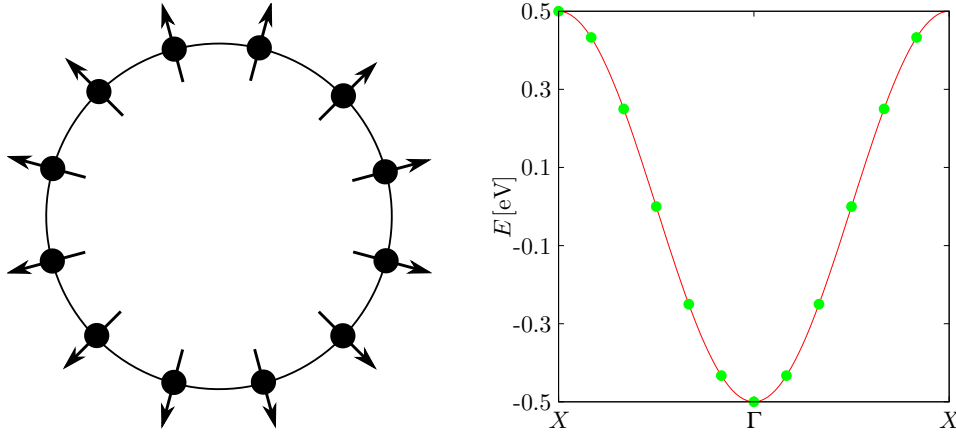


Abbildung 2.3: Eine lineare Kette mit $N = 12$ Gitterplätzen, vollständig ausgerichteten lokalen Momenten und periodischen Randbedingungen (linke Abbildung). Die Dispersion (rechte Abbildung) bei Nächste-Nachbar-Hopping ist durch die Cosinus-Funktion gegeben. Die erlaubten Wellenzahlwerte (grüne Punkte) liegen diskret.

die Zeitentwicklung eines zur Zeit $t = 0$ präparierten Down-Elektrons untersuchen. Dies soll für ein System, bestehend aus einer linearen Kette mit periodischen Randbedingungen, geschehen. In Abbildung 2.3 ist ein System mit $N = 12$ Gitterplätzen und die zugehörige freie Dispersion $\epsilon_{k_x} = -0.5 \cos(k_x)$ in der ersten Brillouinzone dargestellt. Die Gitterkonstante wurde zu $a = 1$ gewählt und das Nächste-Nachbar-Hopping t_{ij} wurde so gewählt, dass sich eine (freie) Bandbreite von $W = 1$ eV ergibt. Die grünen Punkte in der Abbildung zeigen den Wert der Dispersion an den erlaubten Werten der Wellenzahl k_x , die auf Grund des endlichen Gitters diskret liegen. Um nun die Zeitentwicklung des Down-Elektron-Zustands zu untersuchen, wenden wir den Zeitentwicklungsoperator auf diesen Zustand an:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}(t)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t}|\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle \quad (2.33)$$

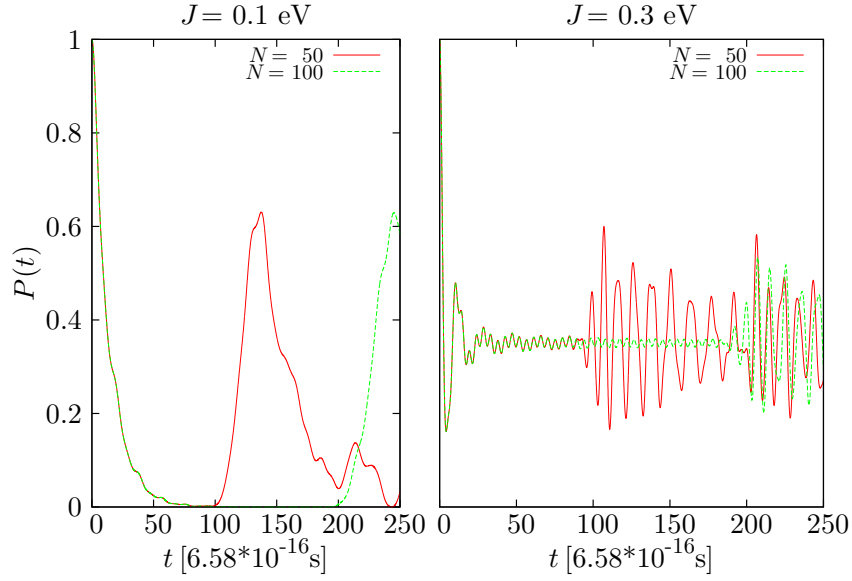
$$= \sum_{n=1}^{N+1} e^{-iE_{\mathbf{k}}^{(n)}t} |E_{\mathbf{k}}^{(n)}\rangle \langle E_{\mathbf{k}}^{(n)}|\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle. \quad (2.34)$$

An dem zu bildenden Skalarprodukt ist sofort abzulesen, dass nur Eigenzustände $|E_{\mathbf{k}}^{(n)}\rangle$, die einen Down-Anteil besitzen, in die Summe eingehen werden. Allgemein wird der Zustand zur Zeit t die Form:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}(t)\rangle = \alpha_{\mathbf{k}}(t)|\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle + \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(t)|\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle \quad (2.35)$$

annehmen.

Die uns interessierende Größe ist die Wahrscheinlichkeit $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ dafür, dass zur Zeit t ein Down-Elektron vorliegt (z.B. bei einem Messprozess.). Diese ist gegeben durch:



Abbildungung 2.4: Die Wahrscheinlichkeit $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ zur Zeit t ein Down-Elektron im System zu finden, wenn dieses zur Zeit $t = 0$ präpariert wurde. Parameter: $\epsilon_{k_x} = 0$ eV, $S = 3.5$, $W = 1$ eV.

$$P_{\mathbf{k}\downarrow}(t) = |\langle \mathbf{k} \downarrow; 0 | \Psi_{\mathbf{k}}(t) \rangle|^2 = |\alpha_{\mathbf{k}}(t)|^2 = \left| \sum_{n=1}^{N+1} e^{-iE_{\mathbf{k}}^{(n)}t} \left| \langle E_{\mathbf{k}}^{(n)} | \mathbf{k} \downarrow; 0 \rangle \right|^2 \right|^2. \quad (2.36)$$

Um sie zu berechnen, bestimmen wir die Eigenwerte in (2.29) mittels einer numerischen Nullstellensuche. Haben wir auf diese Weise alle Eigenwerte bestimmt, können wir mit den Eigenzuständen (2.31) und (2.26) die Vektorprodukte in (2.36) auswerten. In Abbildung 2.4 ist $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ für zwei verschiedene Kopplungsstärken J und jeweils zwei Kettenlängen N gezeigt. Für kleines J ($J = 0.1$ eV, linke Abbildung) sinkt $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ im Laufe der Zeit sehr schnell auf kleine Werte ab – das Down-Elektron zerfällt. Es ist allerdings zu beobachten, dass nach einer gewissen Zeit, die von der Systemgröße N abhängt ($t_w \approx 2N * 6.58 * 10^{-16}$ s), die Wahrscheinlichkeit wieder ansteigt. Es handelt sich hierbei um einen typischen „finite-size“-Effekt. In der Zeit t_w ist die Elektronenwelle einmal auf der Ringkette umgelaufen und beginnt dann mit sich selbst zu interferieren. Im Limes einer unendlich langen Kette sollte dieser Effekt verschwinden und das Down-Elektron wird vollständig zerfallen. Dies soll genauer in den folgenden Abschnitten untersucht werden.

Bei größerem J ($J = 0.3$ eV, rechte Abbildung) oszilliert $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ um einen endlichen Wert, dem es sich für große Zeiten allmählich annähert. Die Ursache für den endlichen Wert von $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ findet sich in der außerhalb der Streuzustände liegenden Eigenenergie, die für große J gut separiert von diesen liegt und deren Beitrag sich in (2.36) darum nicht weginterferiert. Es treten wiederum Finite-Size-Effekte auf. Im folgenden Abschnitt soll der Übergang zu einem unendlich ausgedehnten Gitter genauer untersucht werden.

2.2.4 Das unendliche ausgedehnte Gitter

Lassen wir die Anzahl der Gitterpunkte N gegen unendlich streben, so wird die freie Bandenergie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ eine kontinuierliche Funktion des Wellenzahlvektors. Die endlichen Summen über den Wellenzahlvektor werden in diesem Limes durch Integrale ersetzt:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{V_{\text{BZ}}} \int d\mathbf{k}. \quad (2.37)$$

Das Volumen der ersten Brillouinzone ist hierbei gegeben durch $V_{\text{BZ}} = (2\pi)^d/V_{\text{EZ}}$, wobei d die Dimension und V_{EZ} das Volumen der Einheitszelle des zugrundeliegenden Gitters bezeichnet. Betrachtet man die im letzten Abschnitt für das endliche System konstruierten Eigenzustände, so stellt man fest, dass im Limes des unendlichen Gitters die Zustände mit Down-Elektron-Anteil (2.26) und (2.31), deren Eigenenergien im Bereich $(\epsilon_{\mathbf{k}}^{\min} - \frac{JS}{2} \leq E \leq \epsilon_{\mathbf{k}}^{\max} - \frac{JS}{2})$ liegen, ihre Normierbarkeit verlieren. Lediglich der (Polaron-) Zustand oberhalb ($J > 0$) oder unterhalb ($J < 0$) der Streuzustände bleibt bestehen, wenn $|J|$ genügend groß ist, sodass der Zustand energetisch gut separiert von den Streuzuständen liegt.

Was sind dann aber die korrekten Eigenzustände im unendlichen Gitter? Um diese Frage zu beantworten, konstruieren wir im nächsten Abschnitt passende Streuzustände und zeigen, dass diese im unendlichen System tatsächlich Eigenzustände des Hamiltonoperators werden. Zusätzlich kann man zeigen, dass sie den Hilbertunterraum des magnetischen Polarons aufspannen, d.h. eine vollständige Basis bilden.

Im Anschluss werden wir die zeitabhängige Schrödingergleichung für beliebige Randbedingungen lösen. Anhand dieser Lösung kann dann die Verbindung mit der Greenfunktion und den Streuzuständen diskutiert werden.

Streuzustände

Stellen wir uns vor, dass zu einem bestimmten Zeitpunkt ein Magnon mit Wellenzahl \mathbf{q} und ein Up-Elektron mit Wellenzahl $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ in unserem Gittermodell vorliegen, die durch das Zustandssymbol $|\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle$ bezeichnet werden. Wie entwickelt sich dieses System dann in der Zeit? Asymptotisch entspricht diese Fragestellung einem Streuexperiment und es sollten sich durch das Lösen der Lippmann-Schwinger-Gleichung [83]:

$$|\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^{\pm} = |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle + R_{\pm} \mathcal{H}_1 |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^{\pm} \quad (2.38)$$

Einblicke in das asymptotische Zeitverhalten gewinnen lassen. R_{\pm} bezeichnet hierbei den freien Propagator: $R_{\pm} = (E_0 - \mathcal{H}_0 \pm i0^+)^{-1}$, wobei \mathcal{H}_0 einen passend gewählten freien Anteil des Hamiltonoperators bezeichnet, mit dem

$$\mathcal{H}_0 |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle = E_0 |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle \quad (2.39)$$

gilt. Es ist allerdings keinesfalls klar, ob die Streutheorie für das Problem des magnetischen Polarons überhaupt anwendbar ist. Eine wesentliche Voraussetzung dafür ist, dass die Wechselwirkung örtlich und zeitlich beschränkt ist. Dies ist im endlichen System mit periodischen Randbedingungen sicher nicht erfüllt, könnte aber im unendlichen System gelten.

Van Hove hat in seinen grundlegenden Arbeiten [61, 62] (Selbstenergie-) Effekte benannt, die nicht von einer Streutheorie erfasst werden. Hier sind besonders die

Wolken-Effekte (englisch: cloud effects) zu nennen, also die Entstehung eines neuen Quasiteilchens mit unendlicher Lebensdauer.

Wir werden in diesem Abschnitt die Lippmann-Schwinger-Gleichung lösen und zeigen, dass die so konstruierten Zustände die gesuchten Eigenzustände im Limes des unendlichen Gitters darstellen. Die beschränkte Aussagefähigkeit der Streutheorie wird dann später im Rahmen der Auswertung der zeitabhängigen Schrödingergleichung klargestellt werden.

Zunächst zerlegen wir den Hamiltonoperator (2.2) in einen freien Anteil \mathcal{H}_0 und einen Wechselwirkungsanteil \mathcal{H}_1 :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - z_{\sigma} \frac{JS}{2} \right) \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.40)$$

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{J}{2\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}\sigma} \left(S_{\mathbf{q}}^{\sigma} c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}-\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + z_{\sigma} S_{\mathbf{q}}^z c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \right) + \sum_{\mathbf{k}\sigma} z_{\sigma} \frac{JS}{2} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}. \quad (2.41)$$

Mit dieser Zerlegung ergibt sich:

$$\mathcal{H}_0 |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle = \left(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{JS}{2} \right) |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle = E_0 |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle \quad (2.42)$$

und:

$$\begin{aligned} R_{\pm} \mathcal{H}_1 |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle &= -\frac{J}{2} \sqrt{\frac{2S}{N}} \frac{|\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - JS \pm i0^+} + \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{q}'} \frac{|\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \\ &\stackrel{\text{def.}}{=} |Z_1\rangle + |Z_2\rangle. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Wiederholtes Anwenden der Operatorkombination ergibt:

$$\begin{aligned} R_{\pm} \mathcal{H}_1 |Z_1\rangle &= A_1 |Z_2\rangle, \\ R_{\pm} \mathcal{H}_1 |Z_2\rangle &= A_2 (|Z_1\rangle + |Z_2\rangle), \end{aligned} \quad (2.44)$$

mit:

$$A_1 = \frac{JS}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - JS \pm i0^+}, \quad (2.45)$$

$$A_2 = \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{q}'} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} = \frac{J}{2} G_{\pm}^{(0)}(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}). \quad (2.46)$$

Definieren wir nun die Matrix $\hat{\mathbf{A}}$:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & A_1 \\ A_2 & A_2 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{U}} \hat{\mathbf{D}} \hat{\mathbf{U}}^{-1}, \quad (2.47)$$

2 Das Kondogittermodell

so ist die Matrix $\hat{\mathbf{U}}$, die $\hat{\mathbf{A}}$ diagonalisiert, gegeben als die Matrix der (rechten) Eigenvektoren:

$$\hat{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} A_2 \left(1 - \sqrt{4\frac{A_1}{A_2} + 1}\right) & 0 \\ 0 & A_2 \left(1 + \sqrt{4\frac{A_1}{A_2} + 1}\right) \end{pmatrix}, \quad (2.48)$$

$$\hat{\mathbf{U}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{A_1}{A_2} + \frac{1}{4}} & -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{A_1}{A_2} + \frac{1}{4}} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Damit können wir die Streuzustände angeben:

$$\begin{aligned} |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^\pm &= |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}^T \left(\sum_{l=0}^{\infty} \hat{\mathbf{A}}^l \right) \begin{pmatrix} |Z_1\rangle \\ |Z_2\rangle \end{pmatrix} \\ &= |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle + \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}^T \hat{\mathbf{U}} \left(\sum_{l=0}^{\infty} \hat{\mathbf{D}}^l \right) \hat{\mathbf{U}}^{-1} \begin{pmatrix} |Z_1\rangle \\ |Z_2\rangle \end{pmatrix} \\ &= |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle + \frac{|Z_1\rangle}{1 - A_2(1 + A_1)} + \frac{|Z_2\rangle}{\frac{1}{1+A_1} - A_2} \\ &= \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle + \sum_{\mathbf{q}'} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle \end{aligned} \quad (2.50)$$

mit:

$$\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2NS}} \frac{-JS}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{J}{2}(2S+1) - \frac{J}{2}\Phi_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \pm i0^+)}, \quad (2.51)$$

$$\beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} - \frac{1}{\sqrt{2NS}} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \right) \alpha_{\mathbf{q}'}^{\mathbf{k}}. \quad (2.52)$$

Um zu zeigen, dass die oben konstruierten Streuzustände die gesuchten Eigenzustände darstellen, wenden wir den Hamiltonoperator auf diese an (die vollständige Rechnung findet sich im Anhang, Kapitel 7.3):

$$\mathcal{H}|\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^\pm = \left(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{JS}{2} \right) |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^\pm + \sum_{\mathbf{q}'} \mathcal{R}_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k} \pm} |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle \quad (2.53)$$

mit:

$$\mathcal{R}_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k} \pm} = \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}}}{\sqrt{2NS}} \left\{ \frac{2(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'})(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \pm i0^+ \frac{2\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \right\}. \quad (2.54)$$

Der Restterm (2.54) verschwindet im Limes des unendlichen Gitters wie $\mathcal{O}(1/N)$. Die Streuzustände (2.50) bilden also in diesem Grenzfall tatsächlich die gesuchten Eigenzustände mit kontinuierlich liegenden Eigenwerten im erwarteten Energiebereich.

Es soll nun noch gezeigt werden, dass die Streuzustände im Limes des unendlichen Gitters eine vollständige Basis des $S_{\text{tot}}^z = NS - 1/2$ Unterraums bilden. Dazu müssen

wir zeigen, dass

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^{\pm\pm} \langle \mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}| &= \sum_{\mathbf{q}} \left\{ \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}})^* |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle \langle \mathbf{k} \downarrow; 0| \right. \\
 &\quad + \sum_{\mathbf{q}'} \left(\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}})^* |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle \langle \mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'| + \text{h.c.} \right) \\
 &\quad \left. + \sum_{\mathbf{q}', \mathbf{q}''} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}''}^{\mathbf{k}})^* |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle \langle \mathbf{k} - \mathbf{q}'' \uparrow; \mathbf{q}''| \right\}
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

eine Zerlegung der Eins in diesem Unterraum darstellt. Exemplarisch soll hier das erste Produkt ausgewertet werden. Wir definieren zunächst

$$h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x) \stackrel{\text{Def.}}{=} x - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{J}{2}(2S+1) - \frac{J}{2}\Phi_{\mathbf{k}}(x \pm i0^+), \tag{2.56}$$

wobei $\Phi_{\mathbf{k}}(z)$ bereits in (2.30) definiert wurde. Führen wir noch die freie Zustandsdichte

$$\rho_0(x) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x - \epsilon_{\mathbf{k}}) \tag{2.57}$$

ein, so ergibt sich zunächst:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}})^* &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} \frac{J^2 S}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx \rho_0(x) \left| h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x) \right|^{-2} \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{JS \rho_0(x)}{\Phi_{\mathbf{k}}(x \pm i0^+) - \Phi_{\mathbf{k}}^*(x \pm i0^+)} \left(\frac{1}{h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x)} - \frac{1}{(h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x))^*} \right) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\mp JS}{2\pi i(x - \epsilon_{\mathbf{k}})} \left(\frac{1}{h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x)} - \frac{1}{h_{\mathbf{k}}^{\mp}(x)} \right) \\
 &= \frac{\mp JS}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{1}{x + i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{x - i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \left(\frac{1}{h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x)} - \frac{1}{h_{\mathbf{k}}^{\mp}(x)} \right).
 \end{aligned}$$

Die Funktion $h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x)$ hat ihre Pole bzw. Schnittlinie in der unteren(+)/oberen(−) komplexen Halbebene. Kombiniert man diese mit einem Faktor aus der ersten Klammer, der seinen Pol ebenfalls in der unteren/oberen Halbebene hat, so ergibt das Integral null, da man den Integrationsweg in der jeweils polfreien Halbebene schließen kann und der Integrand wie $\sim 1/x^2$ im Unendlichen verschwindet. Es verbleibt deshalb nur:

$$\begin{aligned}
 \sum_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}})^* &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} \frac{\mp JS}{4\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx \left(\frac{(h_{\mathbf{k}}^{\pm}(x))^{-1}}{x \mp i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}}} - \frac{(h_{\mathbf{k}}^{\mp}(x))^{-1}}{x \mp i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \\
 &\quad \left(\frac{-JS}{-\frac{J}{2}(2S+1) - \frac{J}{2}\Phi_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}})} \right) \\
 &= 1,
 \end{aligned} \tag{2.58}$$

2 Das Kondogittermodell

wobei im vorletzten Schritt der Residuensatz (der Weg wurde jeweils in der Halbebene mit dem einzeln liegenden Pol geschlossen) und im letzte Schritt die Beziehung:

$$\Phi_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}}) = -1 \quad (2.59)$$

benutzt wurden. Durch ähnliche Rechnungen erhält man:

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}})^* &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} 0, \\ \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} (\beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}''}^{\mathbf{k}})^* &\stackrel{N \rightarrow \infty}{=} \delta_{\mathbf{q}', \mathbf{q}''}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Setzen wir diese Beziehungen in (2.55) ein, so ergibt sich tatsächlich die Zerlegung der Eins:

$$\sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{k}-\mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^{\pm\pm} \langle \mathbf{k}-\mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}| \stackrel{N \rightarrow \infty}{=} |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle \langle \mathbf{k} \downarrow; 0| + \sum_{\mathbf{q}} |\mathbf{k}-\mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle \langle \mathbf{k}-\mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}|. \quad (2.61)$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung

Der allgemeine Zustand des Ein-Elektronen-Systems im $(S_{\text{tot}}^z = NS - \frac{1}{2})$ -Sektor des Hilbertraums zur Zeit t hat die Form

$$|\Psi_{\mathbf{k}}(t)\rangle = \alpha_{\mathbf{k}}(t) |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle + \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(t) |\mathbf{k}-\mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle. \quad (2.62)$$

Um die Koeffizienten für einen beliebigen Satz von Anfangsbedingungen zu bestimmen, setzen wir (2.62) in die zeitabhängige Schrödingergleichung ein und erhalten dann das folgende System gekoppelter Differentialgleichungen:

$$\begin{aligned} i\dot{\alpha}_{\mathbf{k}}(t) &= \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2} \right) \alpha_{\mathbf{k}}(t) - J\sqrt{\frac{S}{2N}} \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(t), \\ i\dot{\beta}_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(t) &= \left(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{JS}{2} \right) \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(t) - J\sqrt{\frac{S}{2N}} \alpha_{\mathbf{k}}(t) + \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{q}} \beta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}(t). \end{aligned} \quad (2.63)$$

Die Laplacetransformation:

$$\bar{f}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt; \quad \text{Re}(s) > 0 \quad (2.64)$$

überführt das System gekoppelter Differentialgleichungen (2.63) in ein System algebraischer Gleichungen, die nach den Koeffizienten aufgelöst werden können. Man erhält

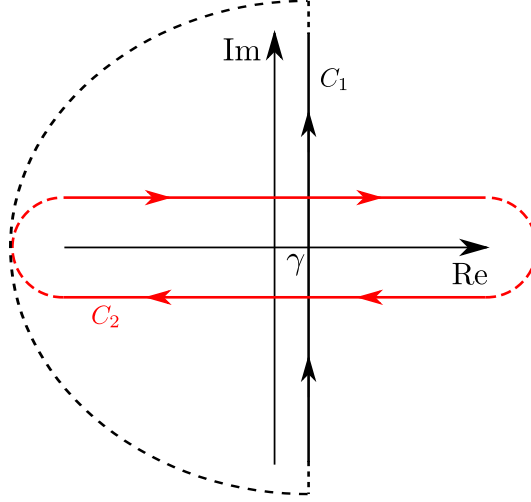


Abbildung 2.5: Integrationsweg der inversen Laplacetransformation in der komplexen Ebene.

für diese im Bildraum (s -Raum):

$$\begin{aligned}
 \bar{\alpha}_{\mathbf{k}}(s) &= \frac{i\alpha_{\mathbf{k}}(0)}{is - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{JS}{2} \left(1 + \frac{JG^{(0)}(is + \frac{JS}{2})}{1 - \frac{J}{2}G^{(0)}(is + \frac{JS}{2})} \right)} \\
 &\quad - \frac{1}{h_{\mathbf{k}}(is + \frac{JS}{2})} \frac{JS}{\sqrt{2NS}} \sum_{\mathbf{q}} \frac{i\beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(0)}{\left(is - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \frac{JS}{2} \right)}, \\
 \bar{\beta}_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(s) &= \frac{i\beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(0) + \frac{1}{\sqrt{2NS}} \left(i\alpha_{\mathbf{k}}(0) - \left(is - \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2} \right) \bar{\alpha}_{\mathbf{k}}(s) \right)}{is - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \frac{JS}{2}}. \quad (2.65)
 \end{aligned}$$

Die Rücktransformation in den Zeitraum ist gegeben durch das Bromwichintegral:

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} \bar{f}(s) ds, \quad (2.66)$$

wobei γ eine reelle Konstante bezeichnet, die größer als die Realteile sämtlicher Singularitäten von $\bar{f}(s)$ sein muss. Die Singularitäten/Schnittlinien von $\bar{\alpha}_{\mathbf{k}}(s)$ liegen alle in einem beschränkten Bereich auf der imaginären Achse, d.h. γ kann jeden Wert $\gamma > 0$ annehmen. Der Integrationsweg C_1 ist in Abb. 2.5 dargestellt. Dieser Weg kann, wie durch die gestichelte Linie angedeutet, im Unendlichen geschlossen werden, da dort der Integrand verschwindet. Durch die Variablentransformation $s \rightarrow -iz$ und eine Deformation der Integrationskontur können wir zu Integrationsweg C_2 übergehen, wobei nun die Singularitäten des Integranden auf der reellen Achse liegen. Es sollen jetzt die Lösungen für zwei verschiedene Anfangsbedingungen bestimmt werden. Wählen wir

$$\text{a) } \alpha_{\mathbf{k}}(t=0) = 1; \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(t=0) = 0, \forall \mathbf{q}, \quad (2.67)$$

2 Das Kondogittermodell

so ergibt sich:

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{k}}(t) &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{C_2} dz \frac{e^{-izt}}{z - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{JS}{2} \left(1 + \frac{JG^{(0)}(z + \frac{JS}{2})}{1 - \frac{J}{2}G^{(0)}(z + \frac{JS}{2})}\right)} \\ &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ixt} \left(G_{\mathbf{k}\downarrow}(x + i0^+) - G_{\mathbf{k}\downarrow}(x - i0^+)\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ixt} S_{\mathbf{k}\downarrow}(x),\end{aligned}\tag{2.68}$$

d.h. die Fouriertransformierte der vollen Down-Spektraldichte des magnetischen Polarons.

Wählen wir hingegen:

$$\text{b) } \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}_n}(0) = 1; \alpha_{\mathbf{k}}(0) = \beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}_m}(0) = 0, \forall m \neq n,\tag{2.69}$$

so erhalten wir:

$$\alpha_{\mathbf{k}}(t) = \frac{JS}{\sqrt{2NS}} \frac{1}{2\pi i} \int_{C_2} dz \frac{e^{-izt}}{\left(z - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}_n} + \frac{JS}{2}\right) h_{\mathbf{k}}\left(z + \frac{JS}{2}\right)},\tag{2.70}$$

wobei $h_{\mathbf{k}}(z)$ in (2.56) definiert wurde. Für große Zeiten t sollte dieser Ausdruck in das Resultat (2.51) der Streutheorie übergehen. Wir werden diese Vermutung im nächsten Kapitel überprüfen, nachdem wir die Techniken für eine detaillierte Zeitanalyse entwickelt haben.

2.2.5 Dynamik des Down-Elektron-Zerfalls

Das Betragsquadrat des Koeffizienten $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ im Ansatz (2.62) der zeitabhängigen Wellenfunktion kann als Wahrscheinlichkeit $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$, ein Down-Elektron mit Wellenzahl \mathbf{k} im System zu finden, interpretiert werden. Diese wurde bereits in Kapitel 2.2.3 für eine endliche, lineare Kette untersucht. In diesem Kapitel werden wir eine tiefergehende Untersuchung von $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ für das unendlich große Gitter liefern.

In Abbildung 2.6 wird $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ der linearen Kette (1D), des quadratischen (2D) und des einfach-kubische Gitters (3D) für zwei Kopplungsstärken: $J = 0.1/0.3$ eV gezeigt, wobei die Anfangsbedingungen (2.67) gewählt wurden. Als freie Elektronendispersion wurde in allen Fällen die Tight-Binding-Dispersion mit Bandbreite $W = 1$ eV gewählt.

Für große J (rechte Spalte in Abbildung 2.6) liegt immer eine endliche Wahrscheinlichkeit vor, ein Down-Elektron zu finden. $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ zeigt charakteristische Oszillationen, die mit der Zeit gedämpft werden. Diese Dämpfung ist um so stärker, je höher die Dimensionalität des zugrunde liegenden Gitters ist. Für große Zeiten nimmt $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ einen konstanten Wert an.

Bei kleineren Werten von J tauchen Teile des Polaronbandes in die Streuzustände ein (wie in Abbildung 2.1 gezeigt). Für Wellenzahlen \mathbf{k} , bei denen $\epsilon_{\mathbf{k}}$ unterhalb einer bestimmten Schwelle liegt, nimmt $P_{\mathbf{k},\downarrow}(t)$ exponentiell ab und strebt für große Zeiten gegen null. Ein Down-Elektron mit dieser Wellenzahl wird also mit der Zeit vollständig zerfallen. Es ist allerdings auch zu erkennen, dass dieser Zerfallsprozess für sehr kleine und große Zeiten nicht durch ein exponentielles Abklingverhalten beschrie-

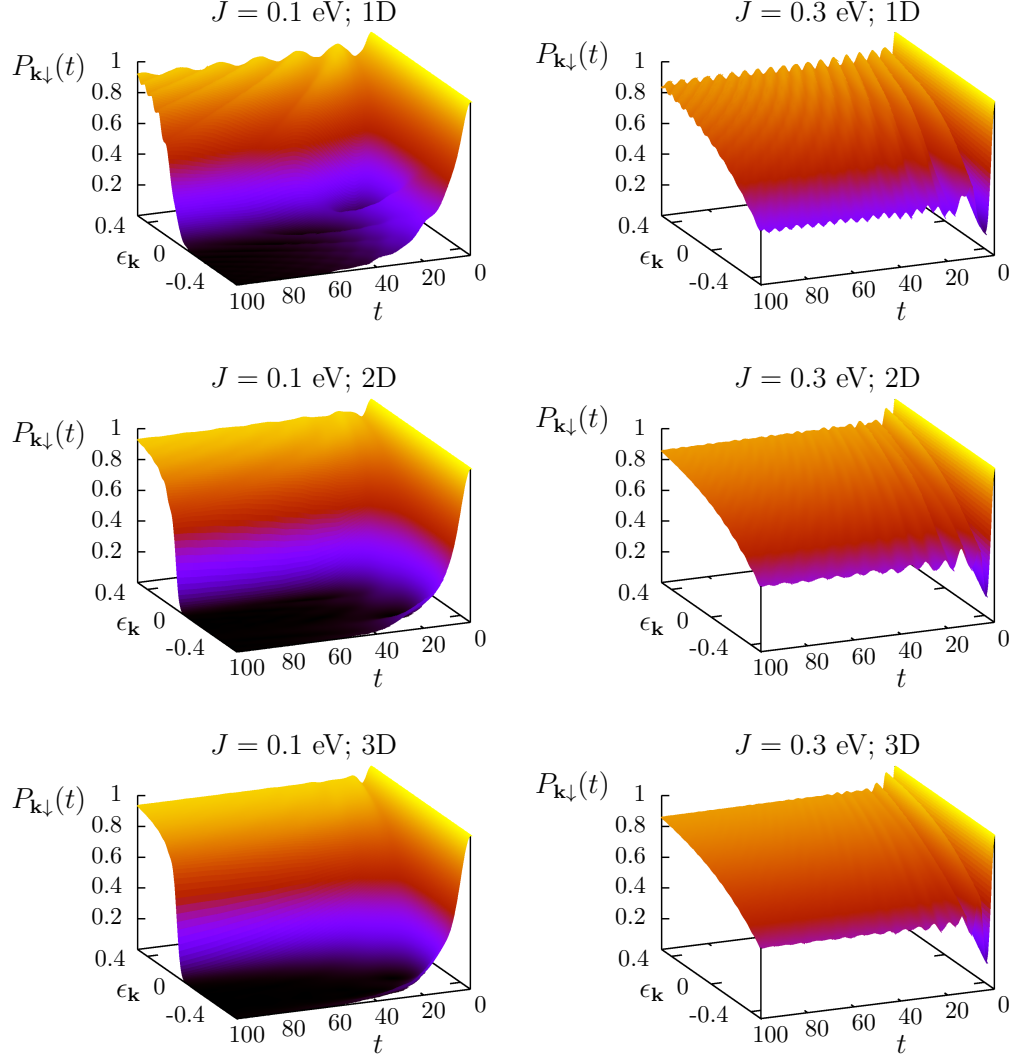


Abbildung 2.6: Wahrscheinlichkeit $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ ein Down-Elektron zu finden als Funktion der Zeit t und der freien Elektronendispersion $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Die Zeilen zeigen die Resultate für unterschiedliche Dimensionalität des zugrunde liegenden Gitters vom einfach-kubischen Typ. Die Spalten zeigen die Resultate für zwei unterschiedliche Werte von J . Die Zeit ist in Einheiten von $\approx 6.58212 \times 10^{-16} \text{ s}$ gegeben. Parameter: $S = 3.5$, $W = 1.0 \text{ eV}$.

ben wird. Im Folgenden sollen die verschiedenen Zeitdomänen genauer analysiert werden.

Das Kurzzeitverhalten

Für kleine Zeiten kann die Exponentialfunktion in (2.68) durch die ersten Glieder ihrer Taylorentwicklung angenähert werden:

$$\begin{aligned}\alpha_{\mathbf{k}}(t) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx S_{\mathbf{k}\downarrow}(x) \left[1 + ixt - \frac{(xt)^2}{2} - i\frac{(xt)^3}{6} + \dots \right] \\ &= 1 + iM_{\mathbf{k}\downarrow}^{(1)}t - \frac{M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(2)}}{2}t^2 - i\frac{M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(3)}}{6}t^3 + O(t^4).\end{aligned}\quad (2.71)$$

Die Spektralmomente $M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(n)}$ können im Grenzfall des magnetischen Polarons exakt berechnet werden und die ersten vier Momente sind im Anhang 7.2 angegeben. Damit steht die Kurzzeitentwicklung von $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ fest:

$$|\alpha_{\mathbf{k}}(t)|^2 = 1 - C_1 t^2 + O(t^4), \quad (2.72)$$

wobei

$$C_1 = M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(2)} - (M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(1)})^2 = \frac{J^2 S}{2}. \quad (2.73)$$

Aus der Tatsache, dass stets $C_1 \geq 0$ gilt, folgt unmittelbar, dass $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ für kleine Zeiten t abnimmt (oder konstant bleibt). Dies sollte natürlich schon aus Gründen der Normerhaltung der elektronischen Wellenfunktion gelten. Der Anstieg der Funktion $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ verschwindet bei $t = 0$ ($dP_{\mathbf{k}\downarrow}(t)/dt|_0 = 0$). Dies führt zu einer quantenmechanischen Variante des berühmten Paradoxons von Zeno - dem quantenmechanischen Zeno-Effekt [91]. Wird die Existenz des Down-Elektrons kontinuierlich⁹ durch einen Messprozess überprüft, so wird dieses Down-Elektron nicht zerfallen.

Mittel- und Langzeitverhalten

Für Zeiten $t > 0$ kann der in der unteren komplexen Halbebene liegende Teil der Integrationskontur C_2 in (2.68) weggelassen werden, da er nicht zum Wert des Integrals beiträgt. Der verbleibende Integrationsweg ist in Abbildung 2.7 mit C_1 (schwarze Linie) bezeichnet. Um das Verhalten für große Zeiten zu studieren, wollen wir diese Integrationskontur so deformieren, dass möglichst große Teile des Integrationsweges in der unteren komplexen Halbebene verlaufen, da diese Beiträge in der Zeit exponentiell abklingen. Um dies zu erreichen, bemerken wir zunächst, dass die Down-Elektron-Greenfunktion eine Schnittlinie im Bereich der Streuzustände auf der reellen Achse besitzt. Um die Integrationskontur über diese Schnittlinie zu ziehen, müssen wir die analytische Fortsetzung der Greenfunktion in diesem Bereich kennen. An Gleichung (2.68) erkennt man, dass dies gleichbedeutend mit der Kenntnis der analytischen Fortsetzung der freien lokalen Greenfunktion $G^{(0)}(z)$ im Bereich ihres kontinuierlichen Spektrums ist. In Anhang 4.1 wird die analytische Fortsetzung der freien lokalen Greenfunktion des linearen, quadratischen und des

⁹ „Kontinuierlich“ bedeutet in genügend kurzen Zeitintervallen Δt , sodass $C_1 \Delta t \approx 0$.

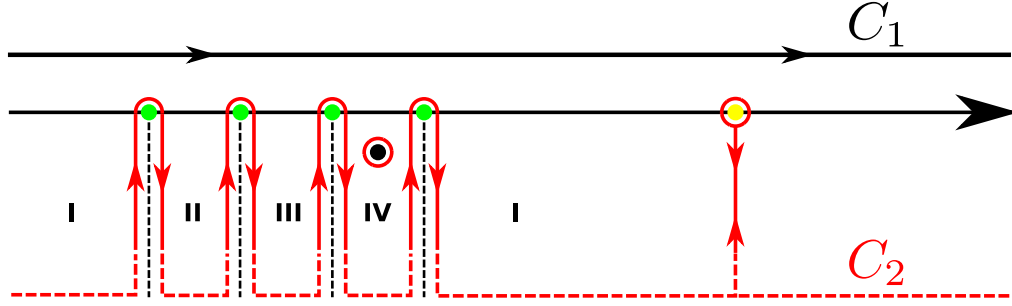


Abbildung 2.7: Deformation der Integrationskontur um das Langzeitverhalten von $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ zu studieren. Die grünen Punkte markieren die Position der Van Hove-Singularitäten des Streuspektrums. Die römischen Zahlen (I,II,III,IV) bezeichnen die verschiedenen Blätter der analytischen Fortsetzung des Down-Elektron-Propagators. Der gelbe Punkt markiert den separierten Polaron-Pol und der schwarze Punkt den komplexen Pol eines zerfallenden Down-Elektron-Zustands.

einfach-kubischen Gitters mit Tight-Binding-Dispersion besprochen. Wir werden im Folgenden alle Ableitungen für das einfach-kubische Gitter durchführen und gegebenenfalls die Abweichungen für die anderen Gittertypen benennen.

Der entscheidende Punkt für die Fortsetzung der Down-Elektron-Greenfunktion ist nun, dass die Van Hove-Singularitäten des Streuspektrums Verzweigungspunkte der Riemannfläche darstellen und die Integrationskontur diese Punkte nicht überschreiten kann. Dies ist in Abbildung 2.7 dargestellt. Die grünen Punkte markieren die Position der Van Hove-Singularitäten des Streuspektrums. Die deformierte Integrationskontur C_2 (rot) kann nicht analytisch über diese Punkte gezogen werden. Die Beiträge zum Integral (2.68), die aus den Integrationswegen links bzw. rechts der Singularitäten stammen, heben sich nicht gegenseitig auf, da die Wege auf unterschiedlichen Blättern der Riemannfläche liegen. Es soll nun beispielhaft das Integral, dessen Weg um die untere Bandkante $x_s^{I/II} = -\left(\frac{JS}{2} + \frac{W}{2}\right)$ führt, näherungsweise bestimmt werden:

$$\begin{aligned}
 \alpha_{\mathbf{k}}^{I/II}(t) &= \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 dx e^{-i\left(x_s^{I/II}+ix\right)t} \left(G_{\mathbf{k}\downarrow}^I(x_s^{I/II}+ix) - G_{\mathbf{k}\downarrow}^{II}(x_s^{I/II}+ix) \right) \quad (2.74) \\
 &= \frac{-1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 dx e^{-i\left(x_s^{I/II}+ix\right)t} \left(C_s^{I/II} \sqrt{x} + \mathcal{O}\left(x^{\frac{3}{2}}\right) \right) \\
 &= \frac{-i}{2\sqrt{\pi}} e^{-ix_s^{I/II}t} \left(\frac{1}{2} C_s^{I/II} t^{-\frac{3}{2}} + \mathcal{O}\left(t^{-\frac{5}{2}}\right) \right).
 \end{aligned}$$

Die anderen Van Hove-Singularitäten geben Anlass zu ähnlichen Ausdrücken und die entsprechenden Koeffizienten C_s sind im Anhang 7.4 zu finden. Man erkennt an (2.74), dass die Van Hove-Singularitäten einen oszillierenden Term zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ beitragen. Dieser Term ist in der Zeit gedämpft. Die Dämpfung gehorcht einem Potenzgesetz, wobei der Exponent nur von der Art der Van Hove-Singularität abhängig ist. Im Falle des einfach-kubischen Gitters zeigt diese ein Quadratwurzelverhalten. Bei

2 Das Kondogittermodell

der linearen Kette mit Tight-Binding-Dispersion bilden sich für bestimmte Werte von ϵ_k an den Streubandkanten Singularitäten der Form $\sim \frac{1}{\sqrt{x}}$ und im quadratischen Gitter findet man einen endlichen Sprung $\sim \Delta_{2D}$. Dies führt zu veränderten Abklingverhalten, die in der Tabelle 2.1 zusammengefasst werden. Ist J groß genug,

	1D	2D	3D
Art der V. H.-Singularität	$\sim \frac{1}{\sqrt{x}}$	$\sim \Delta_{2D}$	$\sim \sqrt{x}$
Abklingverhalten	$\sim t^{-\frac{1}{2}}$	$\sim t^{-1}$	$\sim t^{-\frac{3}{2}}$

Tabelle 2.1: Abklingverhalten der Beiträge der Van Hove-Singularitäten zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ für verschiedene Gitterdimensionen.

existiert ein weiterer Pol der Down-Elektron-Greenfunktion auf der reellen Achse, der in Abbildung 2.7 durch einen gelben Punkt markiert ist. Bezeichnen wir die Position des Pols mit x_{pol} , so ist sein Beitrag zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ durch das Residuum des Integranden (2.68) an diesem Punkt gegeben:

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}}^{\text{pol}}(t) &= \left. \frac{e^{-ixt}}{1 - JS\partial_x \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2}G^{(0)}(x + \frac{JS}{2})} \right)} \right|_{x=x_{\text{pol}}} \\ &= C_{\text{pol}} e^{-ixt}. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Die in der rechten Spalte von Abbildung 2.6 sichtbaren charakteristischen Oszillationen von $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ resultieren aus der Superposition der Beiträge (2.74) und (2.75) zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$. Sie klingen mit der Zeit ab und gehorchen dabei (wenigstens) einem Potenzgesetz, das dem in Tabelle 2.1 aufgelisteten Abklingverhalten entspricht. Dies erklärt auch die sichtbar stärkere Dämpfung der Oszillationen bei ansteigender Gitterdimensionalität.

Für sehr große Zeiten trägt nur noch (2.75) zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ bei und man erhält für die Verweilwahrscheinlichkeit:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{\mathbf{k}\downarrow}(t) = |C_{\text{pol}}|^2. \quad (2.76)$$

Ist die Kopplungsstärke $|J| \gg 1$, so liegt die Polstelle näherungsweise bei $x_{\text{pol}} \approx \frac{J}{2}(S+1)$. Mit Hilfe der Hochenergieentwicklung der freien Greenfunktion kann in diesem Grenzfall ein explizites Ergebnis für $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ abgeleitet werden:

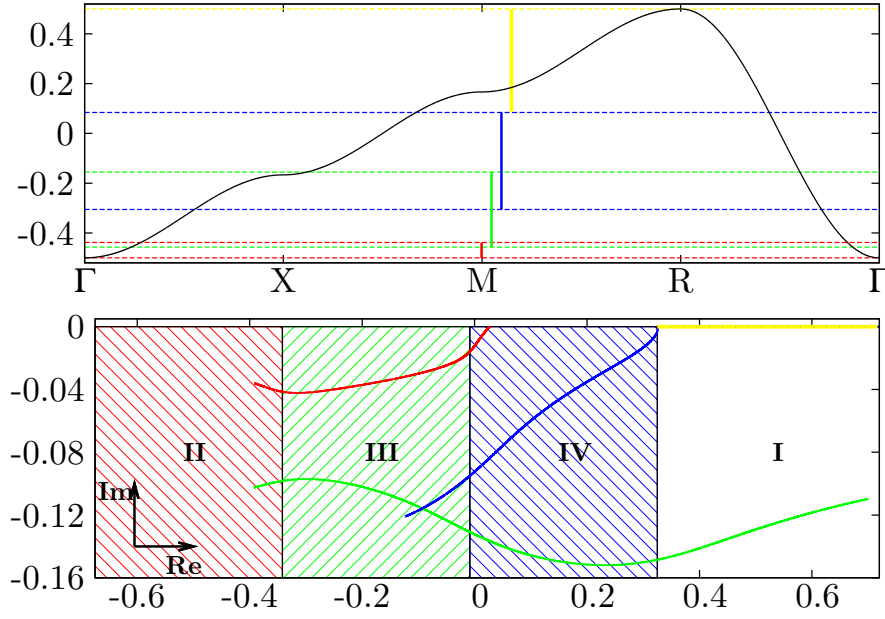
$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_{\mathbf{k}\downarrow}(t) \stackrel{|J| \gg 1}{\approx} \left(\frac{2S}{2S+1} \right)^2. \quad (2.77)$$

Die Spinpolarisation des Elektrons kann leicht aus $P_{\mathbf{k}\downarrow}(t)$ berechnet werden. Es ergibt sich

$$\langle \sigma_z \rangle(t) = \frac{\sum_{\mathbf{q}} |\beta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}(t)|^2 - |\alpha_{\mathbf{k}}(t)|^2}{2} = \frac{1}{2} - |\alpha_{\mathbf{k}}(t)|^2, \quad (2.78)$$

wobei im letzten Schritt die Normierung der Wellenfunktion benutzt wurde.

Wir werden jetzt den Fall besprechen, in dem $|J|$ so klein ist, dass Teile des Polaron-



Abbildungung 2.8: Untere Abbildung: Pollinien in den verschiedenen Blättern der analytischen Fortsetzung, parametrisiert durch $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Die jeweilige Farbe kodiert das Riemannblatt, auf dem die Pole liegen (rot: II, grün: III, blau: IV). Wenn ein Pol in seinem Sichtbarkeitsfenster (gestreifte Ebene derselben Farbe) liegt, so trägt er einen exponentiell abklingenden Term zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ bei. Die gelbe Linie markiert die Positionen des Polaron-Peaks, wenn er außerhalb des Streuspektrums liegt. Obere Abbildung: Freie Elektronendispersion $\epsilon_{\mathbf{k}}$ und die Sichtbarkeitsfenster der verschiedenen Pole. Parameter: $S = \frac{3}{2}$, $J = 0.1$ eV und $W = 1.0$ eV.

bandes im Streuspektrum liegen. Für \mathbf{k} -Werte, bei denen dieser Fall vorliegt, wird das anfänglich präparierte Down-Elektron über die Zeit „zerfallen“ und für große Zeiten wird die elektronische Spinpolarisation dem Wert $\langle \sigma_z \rangle \rightarrow \frac{1}{2}$ zustreben, d.h. die Down-Komponente verschwindet vollständig. Wir erwarten einen exponentiell abklingenden Beitrag zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$. In der Tat erscheinen, sobald der Polaron-Peak in das Streuband eintaucht, komplexe Pole in den Gebieten II, III oder IV der analytischen Fortsetzung der Down-Elektron-Greenfunktion für das einfach-kubische Gitter. Dies ist in Abbildung 2.7 beispielhaft durch den schwarzen Punkt in Gebiet IV skizziert. Die komplexen Pole tragen einen Term zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$ bei, der (2.75) entspricht, jetzt aber mit einer komplexen Polenergie $x_{\text{pol}} = x_r - i\gamma$.

Es existiert jeweils ein Pol in jedem Blatt der in die untere Halbebene fortgesetzten Riemannfläche. In Abbildung 2.8 (unten) sind die Pollinien in der komplexen Ebene (parametrisiert durch $\epsilon_{\mathbf{k}}$) für $J = 0.1$ eV dargestellt. Liegt der Realteil x_r eines Pols innerhalb der Energieregion (II, III oder IV), in der die analytische Fortsetzung des zugehörigen Blattes durchgeführt wurde, so liefert dieser einen Beitrag (2.75) zu $\alpha_{\mathbf{k}}(t)$. Die obere Abbildung in 2.8 zeigt die freie (3D)-Dispersion $\epsilon_{\mathbf{k}}$ entlang ausgewählter Pfade hoher Symmetrie in der ersten Brillouinzone. Die Werte von $\epsilon_{\mathbf{k}}$, für

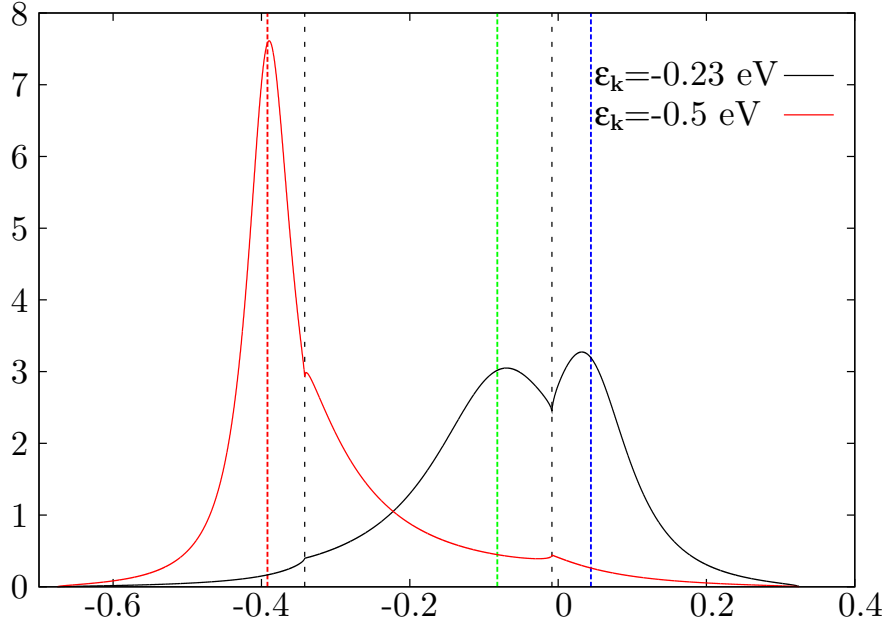


Abbildung 2.9: Down-Elektron-Spektraldichte für zwei Werte von $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Die vertikalen, schwarz-gestrichelten Linien markieren die Position der Van Hove-Singularitäten, die farb-gestrichelten Linien markieren den Realteil der Polstellen. Parameter: $S = \frac{3}{2}$, $J = 0.1$ eV und $W = 1.0$ eV.

die die jeweiligen Pole in ihrem „Sichtbarkeitsfenster“ liegen, können anhand der farbigen horizontalen Linien abgelesen werden. Liegt ein Pol in seinem Sichtbarkeitsbereich, so erscheint ein ausgeprägter Quasiteilchen-Peak in der Spektraldichte, dessen Maximum näherungsweise an der Stelle x_r der Polenergie angenommen wird. Dies ist in Abbildung 2.9 für zwei Werte von $\epsilon_{\mathbf{k}}$ dargestellt. Für $\epsilon_{\mathbf{k}} = -0.5$ eV gibt es lediglich einen Pol im Gebiet II (Endpunkt der roten Pollinie). Man findet einen korrespondierenden Quasiteilchen-Peak in der Spektraldichte (rote Linie) nahe dem Realteil der Polenergie (vertikale, gepunktete Linie). Ein besonders interessanter Fall liegt für $\epsilon_{\mathbf{k}} = -0.23$ eV vor. Aus Abbildung 2.8 kann man ablesen, dass dann zwei Pole in ihren jeweiligen Sichtbarkeitsfenstern liegen (III,IV). Entsprechend finden sich zwei Quasiteilchen-Peaks in der Spektraldichte (schwarze Linie). Das Negative des Imaginärteils der Polposition kann als (halbe) inverse Lebensdauer, $\tau \sim \frac{2}{\gamma}$, des Quasiteilchens interpretiert werden. Dies spiegelt sich auch in der Breite der Quasiteilchen-Peaks wider. Je kleiner τ , je breiter der entsprechende Peak in der Spektraldichte.

Am Anfang dieses Kapitels haben wir die Abweichungen von einem exponentiellen Zerfallsverhalten für sehr kleine Zeiten besprochen. Dasselbe gilt auch für den Limes großer Zeiten. Wenn $t \gg \frac{2}{\gamma}$ gilt, ist der exponentiell abklingende Term (2.75) näherungsweise auf null abgesunken und es verbleiben nur die Beiträge der Van Hove-Singularitäten (2.74). Dies führt zu einem Potenzgesetz ($|\alpha_{\mathbf{k}}(t)|^2 \sim t^{-3}$, 3D-Gitter) im Abklingverhalten für große Zeiten. Dies ist eine allgemeine Eigenschaft von Systemen, deren Spektrum eine untere Schranke besitzt [75].

Wir wollen zum Abschluss dieses Kapitels noch das Langzeitverhalten eines Sys-

tems, für das die Anfangsbedingungen: (2.69) gewählt wurden, untersuchen. Durch Deformation der Integrationskontur C_2 in (2.70), wie in Abbildung 2.7 gezeigt, erhält man für kleine J , sodass $h_1(z)$ keine reelle Nullstelle außerhalb des Streuspektrums besitzt, und große Zeiten t :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \alpha_{\mathbf{k}}(t) = \frac{e^{-i(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{JS}{2})t}}{\sqrt{2NS}} \frac{-JS}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} - \frac{J}{2}(2S+1) - \frac{J}{2}\Phi_{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + i0^+)}. \quad (2.79)$$

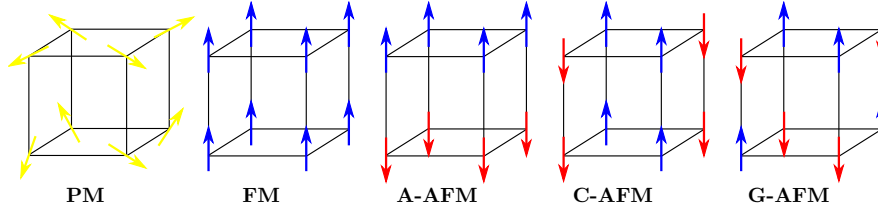
Dies ist bis auf einen trivialen zeitabhängigen Faktor identisch mit den in der Streutheorie abgeleiteten $\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}}$ (2.51). Für größere Werte von J taucht ein weiterer Term auf, der aus der reellen Nullstelle von $h_1(z)$ außerhalb des Streuspektrums stammt. Dieser lässt sich nicht mit Hilfe der Streutheorie ableiten. Der Grund hierfür liegt in den Selbstenergie-Effekten (Formierung eines neuen Quasiteilchens unendlich langer Lebensdauer), wie bereits durch Van Hove [61] festgestellt wurde.

2.3 Phasendiagramme

Im letzten Kapitel haben wir die Zerfalldynamik eines Elektrons untersucht, das in ein ferromagnetisch gesättigtes Gitter, bestehend aus lokalisierten Spins eingebracht wurde und mit diesen über eine heisenbergartige Wechselwirkung interagiert. Als Ursache der ferromagnetischen Ordnung im Spingitter wurde ein direkter Austauschterm angenommen, der allerdings aus Gründen der Einfachheit nicht explizit in die Rechnungen mit aufgenommen wurde. Bei einer endlichen Bandfüllung besteht die Möglichkeit, dass die Elektronen selber eine (indirekte) Wechselwirkung zwischen den lokalisierten Spins hervorrufen, dass also eine magnetische Ordnung auch ohne direkten Austauschterm entsteht. Für metallische Systeme ist diese indirekte Wechselwirkung (für kleine J) vom RKKY-Typ, d.h. langreichweitig und oszillatorisch. Je nach Bandfüllung n und lokaler Kopplung J kann diese zu verschiedenen magnetischen Ordnungen führen. Dies können, neben ferromagnetischer, auch verschiedene antiferromagnetische Konfigurationen sein, aber auch kompliziertere Phasen wie Spiralphasen, verkantete Spinzustände oder Spin-Glas-Phasen sind denkbar. Es erscheint hoffnungslos, alle diese möglichen Phasen bei einer Berechnung des Grundzustandsphasendiagramms zu berücksichtigen, zumal das Kondogittermodell bei endlicher Bandfüllung ein nicht exakt lösbares Vielteilchenproblem darstellt und Approximationen unweigerlich in Kauf genommen werden müssen. Wir werden uns darum hier auf einige wenige, charakteristische Spinkonfigurationen beschränken und dann unter der Annahme, dass eine dieser Konfigurationen vorliegt, die innere Energie U bei $T = 0$ K als Funktion der Bandfüllung und der Kopplung J berechnen. Aus U kann dann das Grundzustandsphasendiagramm (im Unterraum der berücksichtigten Konfigurationen der lokalisierten Momente) ermittelt werden. Dies soll zunächst für das konzentrierte System (an jedem Gitterplatz befindet sich ein lokalisierter Spin) durchgeführt werden. Im Anschluss wird dann der Einfluss von Verdünnung/Unordnung im lokalisierten Momentensystem behandelt, wie er zum Beispiel für eine Beschreibung der verdünnten magnetischen Halbleiter (DMS) essenziell ist.

2.3.1 Modellerweiterungen zur Beschreibung magnetischer Phasen

Für die Beschreibung nichtkollinearer, magnetischer Phasen (z.B. Antiferromagnetismus) ist es nötig, Gitterplätze, die eigentlich auf Grund der Translationssymmetrie des Modellhamiltonoperators (2.1) gleichberechtigt sind, unterschiedliche Richtungen des lokalen magnetischen Moments zuzuordnen. Um dies mathematisch beschreiben zu können, wurde in [141, 50, 49] das ursprüngliche Gitter in Untergitter (mit größerer Einheitszelle) zerlegt, auf denen die lokalisierten Spins wieder ferromagnetisch ordnen (magnetisches Gitter). In Abbildung 2.10 sind die magnetischen Phasen, die sich mit Hilfe einer Zerlegung des einfach-kubischen Gitters in zwei Untergitter beschreiben lassen, gezeigt. Eine solche Zerlegung hat zur Folge, dass alle Fouriertransformationen nun über das magnetische Gitter zu erstrecken sind und die magnetischen Brillouinzonen sich von Konfiguration zu Konfiguration unterscheiden. Wir wollen hier einen anderen Weg einschlagen, der die ursprüngliche Translationsinvarianz des Hamiltonoperators erhält und außerdem auch die Beschreibung komplizierterer magnetischer Phasen zulässt. Dieser Zugang besteht in einer lokalen Rotation des Koordinatensystems in Verbindung mit einem „uniform hopping ap-



Abbildungung 2.10: Magnetische Konfigurationen, die sich durch Zerlegung des einfach-kubischen Gitters in maximal zwei Untergitter beschreiben lassen.

proach“ [22, 149, 77], der im Folgenden erläutert werden soll.

Eine allgemeine lokale Drehung (am Gitterplatz \mathbf{R}_i) des Koordinatensystems kann durch drei Eulerwinkel ϕ_i, θ_i, ψ_i beschrieben werden. Wir werden hier die (z, y, z) -Konvention verwenden, nach der das (alte) Koordinatensystem zuerst um den Winkel ϕ_i um die z-Achse gedreht wird. Anschließend wird das Koordinatensystem um die neue Zwischenposition der y-Achse um den Winkel θ_i gedreht. Zum Schluss erfolgt eine weitere Drehung um die neue z-Achse um den Winkel ψ_i .

Die Wellenfunktion am Gitterplatz \mathbf{R}_i wird im Allgemeinen eine Linearkombination aus Produktzuständen der Form: $|\Psi_i\rangle \sim |S; m_S\rangle \otimes |\frac{1}{2}; \sigma\rangle$ sein, wobei der erste Faktor den lokalisierten Spin und der zweite Faktor den Elektronenspin beschreibt. Unter der lokalen Drehung des Koordinatensystems transformieren sich diese Produktzustände wie folgt [127]:

$$|\bar{\Psi}_i\rangle = e^{-i\phi_i(\hat{S}_i^z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^z)} e^{-i\theta_i(\hat{S}_i^y + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^y)} e^{-i\psi_i(\hat{S}_i^z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^z)} |\Psi_i\rangle, \quad (2.80)$$

wobei $\hat{S}_i^{x,y,z}$ die kartesischen Komponenten des lokalen Spinoperators und $\hat{\sigma}^{x,y,z}$ die Pauli'schen Spinmatrizen bezeichnen. Man beachte, dass die zweite Drehung um die z-Achse nicht mit der ersten zusammengefasst werden kann, da sie nicht mit der Drehung um die y-Achse vertauscht. Die Abfolge der Drehungen genügt dabei der oben beschriebenen (z, y, z) -Konvention.

Aus (2.80) folgt unmittelbar das Transformationsgesetz der quantenmechanischen Operatoren, die auf diese Zustände wirken:

$$\bar{\hat{A}} = e^{-i\phi_i(\hat{S}_i^z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^z)} e^{-i\theta_i(\hat{S}_i^y + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^y)} e^{-i\psi_i(\hat{S}_i^z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^z)} \hat{A} e^{i\psi_i(\hat{S}_i^z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^z)} e^{i\theta_i(\hat{S}_i^y + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^y)} e^{i\phi_i(\hat{S}_i^z + \frac{1}{2}\hat{\sigma}^z)}. \quad (2.81)$$

Mit Hilfe dieser Transformationsformel können wir nun den Hamiltonoperator (2.1) in der neuen Basis mit lokal gedrehtem Koordinatensystem darstellen. Für den Wechselwirkungsanteil folgt:

$$\overline{\sigma \mathbf{S}_i} = \sigma \mathbf{S}_i, \quad (2.82)$$

wie man leicht unter Nutzung der Lie'schen Entwicklungsformel (148) berechnen kann. Man erkennt, dass der Wechselwirkungsanteil invariant unter einer lokalen Drehung des Koordinatensystems ist. Für die elektronischen Erzeuger-/Vernichterooperatoren ergibt sich folgendes Transformationsgesetz:

$$b_{i\sigma}^+ = \overline{c_{i\sigma}^+} = (b_{i\sigma})^+ = e^{-iz_\sigma \frac{\psi_i}{2}} \left(e^{-iz_\sigma \frac{\phi_i}{2}} \cos \frac{\theta_i}{2} c_{i\sigma}^+ + z_\sigma e^{iz_\sigma \frac{\phi_i}{2}} \sin \frac{\theta_i}{2} c_{i-\sigma}^+ \right). \quad (2.83)$$

2 Das Kondogittermodell

Unter Verwendung der Umkehrung:

$$c_{i\sigma}^+ = (c_{i\sigma})^+ = e^{iz_\sigma \frac{\psi_i}{2}} \left(e^{iz_\sigma \frac{\phi_i}{2}} \cos \frac{\theta_i}{2} b_{i\sigma}^+ - z_\sigma e^{iz_\sigma \frac{\phi_i}{2}} \sin \frac{\theta_i}{2} b_{i-\sigma}^+ \right) \quad (2.84)$$

ergibt sich aus (2.1) für den Hamiltonoperator im lokal gedrehten Koordinatensystem:

$$\bar{H} = \sum_{ij\sigma\sigma'} u_{ij}^{\sigma\sigma'} b_{i\sigma}^+ b_{j\sigma'} - \frac{J}{2} \sum_{i\sigma} \left(z_\sigma S_i^z b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma} + S_i^\sigma b_{i-\sigma}^+ b_{i\sigma} \right), \quad (2.85)$$

wobei die neuen Hoppingintegrale durch:

$$u_{ij}^{\sigma\sigma} = t_{ij} \left(e^{\frac{i}{2} z_\sigma (\psi_i + \phi_i - \psi_j - \phi_j)} \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} + e^{\frac{i}{2} z_\sigma (\psi_i - \phi_i - \psi_j + \phi_j)} \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} \right), \quad (2.86)$$

$$u_{ij}^{\sigma-\sigma} = -z_\sigma t_{ij} \left(e^{\frac{i}{2} z_\sigma (\psi_i + \phi_i + \psi_j - \phi_j)} \cos \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} - e^{\frac{i}{2} z_\sigma (\psi_i - \phi_i + \psi_j + \phi_j)} \sin \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} \right)$$

gegeben sind. Der so transformierte Hamiltonoperator ist noch nicht translationsinvariant, da das Hopping $u_{ij}^{\sigma\sigma'}$ über die lokalen Drehwinkel explizit von den Gitterplätzen \mathbf{R}_i und \mathbf{R}_j abhängt. Um die Translationsinvarianz wieder herzustellen, wählen wir $\psi_i = \phi_i = 0$ und die Winkel θ_i so, dass sich benachbarte Winkel in einer Raumrichtung immer um einen konstanten Wert unterscheiden ($\theta_{i+1} - \theta_i = \theta_d$, $d = x, y, z$). Für das einfach-kubische Gitter ergeben sich in Tight-Binding-Näherung dann die fouriertransformierten Hoppingintegrale:

$$u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} = 2t \left(\cos \frac{\theta_x}{2} \cos q_x + \cos \frac{\theta_y}{2} \cos q_y + \cos \frac{\theta_z}{2} \cos q_z \right), \quad (2.87)$$

$$u_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} = z_\sigma 2it \left(\sin \frac{\theta_x}{2} \sin q_x + \sin \frac{\theta_y}{2} \sin q_y + \sin \frac{\theta_z}{2} \sin q_z \right). \quad (2.88)$$

Auf den ersten Blick erscheinen die oben zu den Drehwinkeln gemachten Annahmen als eine sehr starke Einschränkung des Raumes der beschreibbaren magnetischen Phasen. Man macht sich aber leicht klar, dass alle Phasen des einfach-kubischen Gitters, die durch eine Zerlegung in zwei Untergitter beschreibbar sind, auch in der neuen Theorie enthalten sind. So ergibt sich die ferromagnetische Phase (FM) durch die Winkel $(\theta_x, \theta_y, \theta_z) \rightarrow (0, 0, 0)$, A-Typ-Antiferromagnetismus (AFM) durch $(0, 0, \pi)$, C-Typ-AFM durch $(0, \pi, \pi)$ und G-Typ-AFM durch (π, π, π) . Darüber hinaus ist auch die Beschreibung planarer Spiralphasen ($0 < \theta_d < \pi$) möglich, die nicht durch eine einfache Untergitterzerlegung beschrieben werden können.

Die innere Energie

Die innere Energie U des Kondogittermodells ist durch den thermodynamischen Erwartungswert des Hamiltonoperators (2.85) gegeben. Eine einfache Rechnung unter Ausnutzung des Spektraltheorems [100] ergibt, dass sich die innere Energie durch die lokale, retardierte elektronische Greenfunktion darstellen lässt:

$$U = \langle H \rangle = \sum_{i\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} E f_-(E) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im } G_{ii}^{\sigma\sigma}(E) \right) dE. \quad (2.89)$$

Während diese Formel noch exakt ist, müssen bei der tatsächlichen Berechnung der Greenfunktion Approximationen in Kauf genommen werden, da es sich beim Kondo-Gittermodell um ein im Allgemeinen nicht lösbares Vielteilchenproblem handelt. Wir werden darum im nächsten Abschnitt die in dieser Arbeit vorgenommene Näherungsstrategie besprechen.

Lösung des Vielteilchenproblems ohne Verdünnung

Unser Startpunkt ist die Bewegungsgleichung der elektronischen Greenfunktion:

$$\sum_{l\sigma''} (E\delta_{il}^{\sigma\sigma''} - u_{il}^{\sigma\sigma''}) G_{lj}^{\sigma''\sigma'}(E) = \delta_{ij}^{\sigma\sigma'} - \frac{J}{2} \left(I_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) + F_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) \right), \quad (2.90)$$

wobei $I_{ikj}^{\sigma\sigma'}(E) = z_\sigma \langle\langle \hat{S}_i^z b_{k\sigma}; b_{j\sigma'}^+ \rangle\rangle$ als Ising-Greenfunktion und $F_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) = \langle\langle \hat{S}_i^{-\sigma} b_{i-\sigma}; b_{j\sigma'}^+ \rangle\rangle$ als Spinflip-Greenfunktion bezeichnet wird. Das Phasendiagramm soll konstruiert werden, indem die inneren Energien der verschiedenen Phasen, die als äußere Zwangsbedingung aufgefasst werden, bei $T = 0$ K verglichen werden. Dabei wird angenommen, dass der lokalisierte Spin am Gitterplatz \mathbf{R}_i jeweils seine maximale z-Komponente einnimmt, d.h. der Erwartungswert des \hat{S}_i^z Operators (im gedrehten Koordinatensystem) gleich S ist. Unter dieser Annahme kann die Ising-Greenfunktion sofort entkoppelt werden:

$$z_\sigma \langle\langle \hat{S}_i^z b_{k\sigma}; b_{j\sigma'}^+ \rangle\rangle \rightarrow z_\sigma S G_{kj}^{\sigma\sigma'}(E). \quad (2.91)$$

Nimmt man nun noch an, dass der Einfluss der Spinflip-Greenfunktion gering ist, so können wir eine approximative Lösung der elektronischen Greenfunktion angeben:

$$\sum_{\sigma''} \left((E + z_\sigma \frac{JS}{2}) \delta^{\sigma\sigma''} - u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma''} \right) G_{\mathbf{q}}^{\sigma''\sigma'}(E) = \delta^{\sigma\sigma'}. \quad (2.92)$$

Wir werden diese Lösung im Weiteren als Molekularfeld-Lösung (MF) bezeichnen. Die spindagonalen MF-Greenfunktionen, die zur Berechnung der inneren Energie (2.89) benötigt werden, haben dann die explizite Form:

$$G_{\mathbf{q}\text{MF}}^{\sigma\sigma}(E) = \frac{1}{(E - u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} + z_\sigma \frac{JS}{2})(E - u_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} + z_{-\sigma} \frac{JS}{2}) - u_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} u_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma}}. \quad (2.93)$$

Der Einfluss der Spinflip-Greenfunktion wurde von M. Stier et. al. [140, 141] im Rahmen eines Momente erhaltenden Entkopplungsansatzes (englisch: moment conserving decoupling approach (MCDA)) untersucht. Die sich daraus ergebenden Änderungen der Ergebnisse im Vergleich zu den Molekularfeld-Resultaten werden an entsprechender Stelle im Ergebnisteil besprochen.

2.3.2 Das verdünnte, ungeordnete Spinsystem

Theorie ungeordneter Systeme bei nichtspindiaagonalem Hopping

Setzt sich das Kristallgitter aus mehreren Atomsorten zusammen (Legierung), die entsprechend ihrer Konzentration zufällig auf die Gitterplätze verteilt sind, so wird sich im Allgemeinen sowohl das lokale Potential als auch das Hopping zu Nachbar-

2 Das Kondogittermodell

plätzen zufällig von Gitterplatz zu Gitterplatz ändern. Im einfacheren Fall, in dem nur das lokale Potential von der jeweiligen Legierungskomponente abhängt, spricht man von diagonalen Substitutionsunordnung[101]. Der Hamiltonoperator hat dann die Form:

$$\mathcal{H}_{\text{SU}} = \sum_{ij\sigma\sigma'} u_{ij}^{\sigma,\sigma'} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'} + \sum_{i\sigma} \eta_{(i)\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}. \quad (2.94)$$

Die $\eta_{(i)\sigma}$ variieren je nach vorliegender Atomsorte am Gitterplatz \mathbf{R}_i . Man beachte, dass das Hopping hier im Vergleich zur Standardableitung als nichtspindiatonal angenommen wird. Diese Erweiterung ist notwendig, um an späterer Stelle unterschiedliche magnetische Konfigurationen zu behandeln.

Die physikalischen Eigenschaften des Systems werden nun von der konkreten Konfiguration (Verteilung) der Atome abhängig. Ist diese Verteilung eine an jedem Gitterplatz gleich wahrscheinliche Zufallsverteilung, so wird aber im makroskopisch großen Gitter eine „Selbstmittelung“ eintreten, d.h. die messbaren physikalischen Größen werden durch die konfigurationsgemittelten Ergebnisse der Theorie beschrieben¹⁰. Das Problem kann als gelöst gelten, wenn es uns gelingt, die konfigurationsgemittelte Greenfunktion-Matrix:

$$\langle \mathbf{G}_{ij}(E) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left(E\delta^{\sigma\sigma'} - u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma'} - \Sigma_{\text{SU}\mathbf{q}}^{\sigma\sigma'}(E) \right)^{-1} \quad (2.95)$$

zu bestimmen. Dies gelingt mit Hilfe der Methode des effektiven Mediums, die wir jetzt kurz diskutieren wollen. Eine ausführlichere Darstellung findet sich z.B. in [101]. Zunächst führen wir ein neues, effektives Medium ein, dessen Hamiltonoperator denselben Hoppingterm wie der Hamiltonoperator des ungeordneten Systems (2.94) hat, dessen lokales Potential aber für alle Gitterplätze gleich ist und einen beliebigen reellen oder auch komplexen Wert annehmen kann:

$$\mathcal{H}_{\text{K}} = \sum_{ij\sigma\sigma'} u_{ij}^{\sigma,\sigma'} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'} + \sum_{i\sigma} v_{\text{K}\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}. \quad (2.96)$$

Wegen der Translationsinvarianz kann die Greenfunktion für das effektive Medium mittels einer Fouriertransformation auf Wellenzahlen \mathbf{q} exakt berechnet werden:

$$\mathbf{R}_{\mathbf{q}}(E) = \left((E - v_{\text{K}\sigma})\delta_{\sigma\sigma'} - u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma'} \right)^{-1} \quad (2.97)$$

und ergibt eine Matrix in den Spin-Indizes. Mit Hilfe des Potentials des effektiven Mediums können wir den Hamiltonoperator (2.94) auch als:

$$\mathcal{H}_{\text{SU}}^{\text{K}} = \sum_{ij\sigma\sigma'} u_{ij}^{\sigma,\sigma'} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'} + \sum_{i\sigma} v_{\text{K}\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} \underbrace{(\eta_{(i)\sigma} - v_{\text{K}\sigma})}_{V_{\text{K}(i)\sigma}} c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma} \quad (2.98)$$

schreiben. Stellt man für diesen Hamiltonoperator die Bewegungsgleichung der Ein-Elektronen-Greenfunktion auf, so kann man aus dieser durch einfaches Umstellen

¹⁰Dies sollte zumindest dann der Fall sein, wenn das System fern von kritischem Verhalten nahe eines Phasenübergangs ist.

die Dysongleichung:

$$G_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) = R_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) + \sum_{l\sigma''} R_{il}^{\sigma\sigma''}(E) V_{K(l)\sigma''} G_{lj}^{\sigma''\sigma'}(E) \quad (2.99)$$

gewinnen. Iteriert man diese Gleichung, ergibt sich:

$$G_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) = R_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) + \sum_{lm\sigma''\sigma'''} R_{il}^{\sigma\sigma''}(E) T_{lm}^{\sigma''\sigma'''} R_{mj}^{\sigma'''\sigma'}(E). \quad (2.100)$$

Die neu eingeführte T -Matrix ist durch:

$$\begin{aligned} T_{ij}^{\sigma\sigma'} &= V_{K(i)\sigma} \delta_{ij}^{\sigma\sigma'} + V_{K(i)\sigma} R_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) V_{K(j)\sigma'} \\ &\quad + \sum_{l\sigma''} V_{K(i)\sigma} R_{il}^{\sigma\sigma''}(E) V_{K(l)\sigma''} R_{lj}^{\sigma''\sigma'}(E) V_{K(j)\sigma'} + \dots \end{aligned} \quad (2.101)$$

gegeben. Für die gemittelte Greenfunktion ergibt sich dann:

$$\langle G_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) \rangle = R_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) + \sum_{lm\sigma''\sigma'''} R_{il}^{\sigma\sigma''}(E) \langle T_{lm}^{\sigma''\sigma'''} \rangle R_{mj}^{\sigma'''\sigma'}(E), \quad (2.102)$$

da die Unordnung nur in den Potentialen $V_{K(i)\sigma}$ steckt. Die entscheidende Idee zur Lösung des Unordnungsproblems besteht nun darin, das bisher nicht konkret festgelegte effektive Medium so zu variieren, dass die resultierenden Quasiteilchen nicht mehr an den lokalen Potentialen streuen. Dies ist genau dann der Fall, wenn

$$\langle T_{ij}^{\sigma\sigma'} \rangle = 0 \quad (2.103)$$

gilt. Für die gemittelte Greenfunktion ergibt sich dann:

$$\langle G_{ij}^{\sigma\sigma'}(E) \rangle = R_{ij}^{\sigma\sigma'}(E), \quad (2.104)$$

das Unordnungsproblem ist also gelöst, da die Greenfunktion des effektiven Mediums ja nach Voraussetzung bekannt ist. Leider wird sich im Allgemeinen die Bedingung (2.103) nicht exakt erfüllen lassen, da die konfigurationsgemittelte T -Matrix nicht bekannt ist.

Um wenigstens zu einer näherungsweisen Lösung zu kommen, führen wir zunächst eine neue Größe ein, die atomare Streumatrix $t_i^{\sigma\sigma'}$. Diese ergibt sich aus der T -Matrix (2.101), wenn man annimmt, dass das Unordnungspotential $V_{K(i)\sigma}$ nur an einem Gitterplatz \mathbf{R}_i „eingeschaltet“, d.h. von Null verschieden ist:

$$\begin{aligned} t_i^{\sigma\sigma'} &= V_{K(i)\sigma} \delta^{\sigma\sigma'} + V_{K(i)\sigma} R_{ii}^{\sigma\sigma'}(E) V_{K(i)\sigma'} \\ &\quad + \sum_{\sigma''} V_{K(i)\sigma} R_{ii}^{\sigma\sigma''}(E) V_{K(i)\sigma''} R_{ii}^{\sigma''\sigma'}(E) V_{K(i)\sigma'} + \dots \end{aligned} \quad (2.105)$$

2 Das Kondogittermodell

Mit Hilfe der lokalen Streumatrix kann man die T -Matrix wie folgt darstellen:

$$\begin{aligned}
T_{ij}^{\sigma\sigma'} &= t_i^{\sigma\sigma'} \delta_{ij} \\
&+ \sum_{\sigma_1, \sigma_2} t_i^{\sigma\sigma_1} (1 - \delta_{ij}) R_{ij}^{\sigma_1\sigma_2}(E) t_j^{\sigma_2\sigma'} \\
&+ \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} \sum_l t_i^{\sigma\sigma_1} (1 - \delta_{il}) R_{il}^{\sigma_1\sigma_2}(E) t_l^{\sigma_2\sigma_3} (1 - \delta_{lj}) R_{lj}^{\sigma_3\sigma_4}(E) t_j^{\sigma_4\sigma'} \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{2.106}$$

Die Terme: $1 - \delta_{ij}$ stellen sicher, dass keine Doppelzählungen auftreten. Die Konfigurationsmittelung der T -Matrix führt dann auf Ausdrücke der Form:

$$\left\langle t_i^{\sigma\sigma_1} R_{il}^{\sigma_1\sigma_2}(E) t_l^{\sigma_2\sigma_3} \dots R_{mj}^{\sigma_{N-1}\sigma_N}(E) t_j^{\sigma_N\sigma'} \right\rangle. \tag{2.107}$$

Die Mittelung faktorisiert nur für den Fall, dass alle Ortsindizes verschieden voneinander sind. Die sogenannte T -Matrix-Approximation [101] besteht in der Annahme, dass dies allgemein gilt, man also den obigen Ausdruck als:

$$\left\langle t_i^{\sigma\sigma_1} \right\rangle R_{il}^{\sigma_1\sigma_2}(E) \left\langle t_l^{\sigma_2\sigma_3} \right\rangle \dots R_{mj}^{\sigma_{N-1}\sigma_N}(E) \left\langle t_j^{\sigma_N\sigma'} \right\rangle \tag{2.108}$$

schreiben kann. Die Forderung (2.103) kann dann erfüllt werden, wenn:

$$\left\langle t_i^{\sigma\sigma'} \right\rangle = 0 \tag{2.109}$$

gilt. Diese Bedingung kann nun genutzt werden, um das effektive Medium (selbstkonsistent) zu bestimmen, für das (2.104) gilt. Diese Methode ist in der Literatur als Methode des kohärenten Potentials¹¹ [28] bekannt. Wir wollen jetzt noch die expliziten Bestimmungsgleichungen für ein Legierungsproblem mit $2m$ Komponenten $\eta_\sigma^{(m)}$, die mit der jeweiligen Konzentration $c_{m\sigma}$ vorliegen mögen, ableiten. Mit (2.105) kann man zunächst die lokale Streumatrix in Form einer Matrix in den Spinindizes darstellen:

$$\mathbf{t}_i = \left(\mathbf{1} - \mathbf{V}_{K(i)} \mathbf{R}_{ii}(E) \right)^{-1} \mathbf{V}_{K(i)}, \tag{2.110}$$

wobei die $\mathbf{V}_{K(i)}$ -Matrix durch:

$$\mathbf{V}_{K(i)} = \begin{pmatrix} \eta_{(i)\uparrow} - v_{K\uparrow} & 0 \\ 0 & \eta_{(i)\downarrow} - v_{K\downarrow} \end{pmatrix} \tag{2.111}$$

gegeben ist. Diese Matrix ist nach Ansatz der lokalen Potentiale spindagonal. Man kann zeigen, dass auch die lokale Green-Matrix des effektiven Mediums diese Eigenschaft hat, wenn man ein Hopping der Form (2.87) annimmt. Die nichtdiagonale Greenfunktion hat nach (2.97) die Form:

$$R_{ii}^{\sigma-\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{u_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma}}{(E - u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} - v_{K\sigma})(E - u_{\mathbf{q}}^{-\sigma-\sigma} - v_{K-\sigma}) - u_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} u_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma}}. \tag{2.112}$$

¹¹englisch: coherent potential approximation (CPA).

Wegen der Eigenschaft $u_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma} = -u_{-\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma}$ verschwindet diese Greenfunktion, da ihr Nenner symmetrisch unter Inversion des Wellenzahlvektors ist. Die konfigurationsgemittelten Matrixelemente der atomaren Streumatrix ergeben sich dann aus (2.110) zu:

$$\langle t_i^{\sigma\sigma} \rangle = \sum_m c_{m\sigma} \frac{\eta_{\uparrow}^{(m)} - v_{K\uparrow}}{1 - R_{ii}^{\sigma\sigma}(E)(\eta_{\uparrow}^{(m)} - v_{K\uparrow})} \quad (2.113)$$

$$\langle t_i^{\sigma-\sigma} \rangle = 0. \quad (2.114)$$

Mit der Forderung (2.109) ergibt sich eine selbstkonsistente Bestimmungsgleichung für das Potential des effektiven Mediums, das wegen der Energieabhängigkeit der lokalen Greenfunktion selbst energieabhängig wird:

$$v_{K\sigma} \rightarrow \Sigma_{\sigma}^{\text{CPA}}(E). \quad (2.115)$$

Die Bestimmungsgleichungen für die beiden Spinrichtungen sind dabei wegen:

$$R_{ii}^{\sigma\sigma}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{E - u_{\mathbf{q}}^{-\sigma-\sigma} - \Sigma_{\sigma}^{\text{CPA}}(E)}{(E - u_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} - \Sigma_{\sigma}^{\text{CPA}}(E))(E - u_{\mathbf{q}}^{-\sigma-\sigma} - \Sigma_{-\sigma}^{\text{CPA}}(E)) - u_{\mathbf{q}}^{\sigma-\sigma} u_{\mathbf{q}}^{-\sigma\sigma}} \quad (2.116)$$

miteinander gekoppelt.

Die soeben abgeleitete CPA-Selbstenergie zur Lösung des Unordnungsproblems ist eine lokale Größe, d.h. sie trägt keinerlei Wellenzahlabhängigkeit. Mit Hilfe einer diagrammatischen Entwicklung kann man zeigen, dass die CPA unter allen lokalen Theorien (englisch: single site approximation (SSA)) zur Lösung des Unordnungsproblems die mit Abstand beste ist[101].

Das verdünnte, ungeordnete Spingitter

Im letzten Abschnitt haben wir eine Theorie zur Mittelung der Greenfunktion einer Legierung aus mehreren Atomsorten mit diagonalen Substitutionsunordnung entwickelt. Betrachtet man den Hamiltonoperator des verdünnten und ungeordneten Kondogittermodells:

$$H = \sum_{ij\sigma\sigma'} u_{ij}^{\sigma\sigma'} b_{i\sigma}^+ b_{j\sigma'} - \frac{J}{2} \sum_{i\sigma} x_i \left(z_{\sigma} S_i^z b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma} + S_i^{\sigma} b_{i-\sigma}^+ b_{i\sigma} \right), \quad (2.117)$$

bei dem im Wechselwirkungsanteil ein Besetzungsindikator auftaucht, der eins ist, wenn am Gitterplatz \mathbf{R}_i ein lokaler Spin und null, wenn kein lokaler Spin existiert, so hat dieser noch nicht die Form des Legierungshamiltonoperators (2.94). Der Wechselwirkungsoperator ist zwar lokal, enthält aber neben den elektronischen Operatoren auch Spinoperatoren und ist nicht spindagonal (bezogen auf den elektronischen Spin). Wir können den Hamiltonoperator aber auf die Form einer Legierung bringen, wenn wir den Wechselwirkungsanteil durch seine Molekularfeld-Näherung ersetzen:

$$x_i \left(z_{\sigma} S_i^z b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma} + S_i^{\sigma} b_{i-\sigma}^+ b_{i\sigma} \right) \rightarrow x_i z_{\sigma} \langle S_i^z \rangle b_{i\sigma}^+ b_{i\sigma}. \quad (2.118)$$

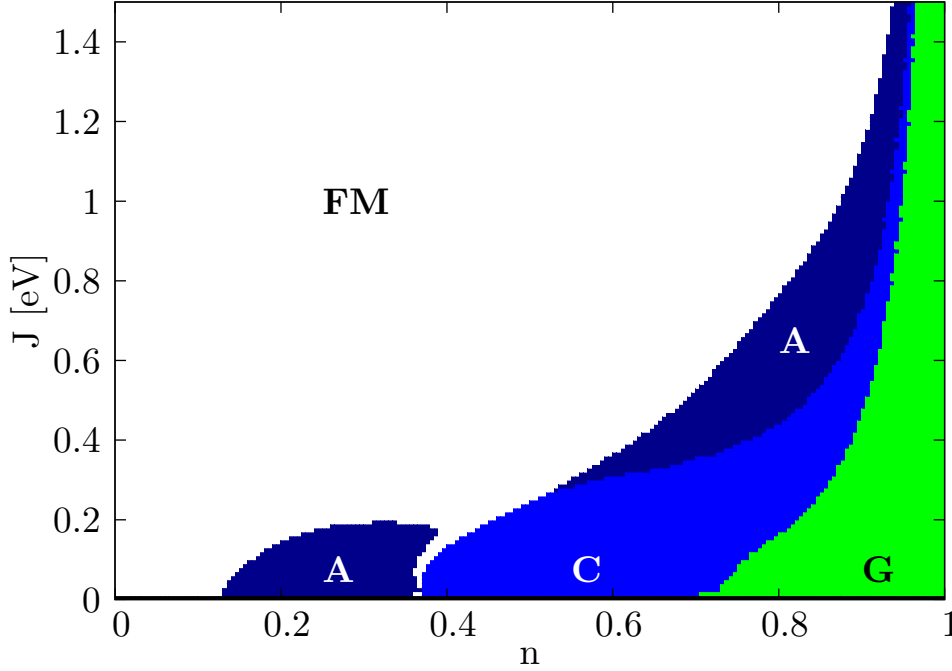
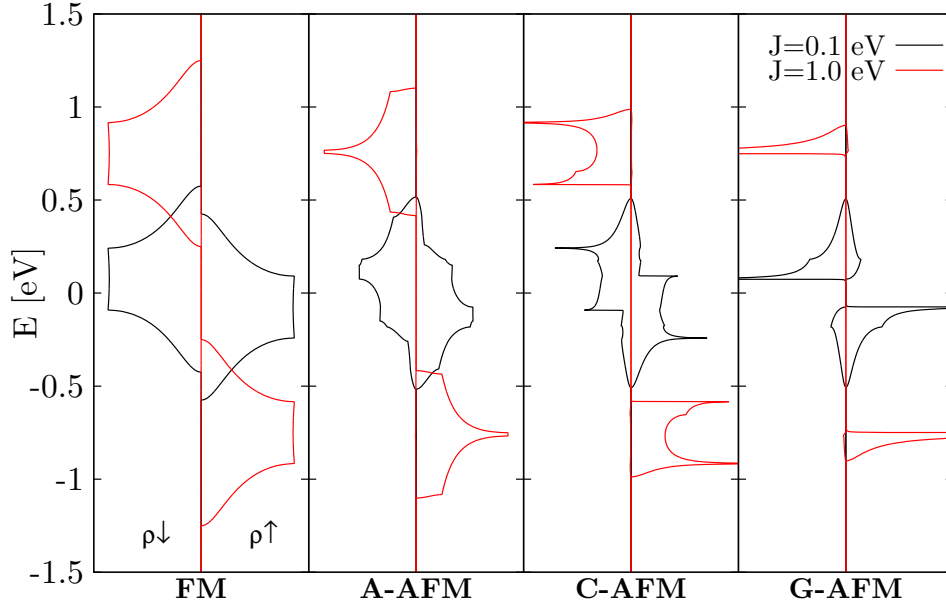


Abbildung 2.11: MF-Phasendiagramm als Funktion der Bandfüllung n und der lokalen Kopplungsstärke J . Parameter: $S = \frac{3}{2}$, $W = 1.0$ eV und $T = 0$ K.

In der Molekularfeld-Näherung ist das Unordnungsproblem durch den zufälligen Wechsel des lokalen Potentials η_σ für magnetische (M) und nichtmagnetische (NM) Gitterplätze: $\eta_\sigma^M = -z_\sigma \langle S_i^z \rangle \frac{J}{2}$; $\eta_\sigma^{NM} = 0$, mit den jeweiligen Konzentrationen c und $1 - c$ gegeben. Das Problem ist damit äquivalent zu einer binären Legierung mit lokaler Unordnung und man spricht darum von einer Legierungsanalogie [101].

2.3.3 Ergebnisse für das unverdünnte System

Wir haben die inneren Energien der in Abbildung 2.10 dargestellten magnetischen Phasen als Funktion der Bandbesetzung n und der lokalen Austauschwechselwirkung J bei $T = 0$ K berechnet. Aus diesen kann dann das Phasendiagramm im Unter-raum der berücksichtigten Phasen konstruiert werden. Das Resultat ist in Abbildung 2.11 gezeigt. Man erkennt, dass für alle $J > 0$ eV eine typische Abfolge der Phasen auftritt. Für kleine n findet man stets Ferromagnetismus (FM). Mit steigendem n tauchen die antiferromagnetischen Phasen in der Reihenfolge A-Typ (A-AFM), C-Typ (C-AFM) und G-Typ (G-AFM) auf. Insgesamt wird der ferromagnetische Bereich mit steigendem J größer. Bei Halbfüllung ($n = 1$) liegt immer G-AFM vor. Wie kommt nun diese Phasenabfolge zu Stande? Da die innere Energie (2.89) durch das Integral über die spinsummierte Quasiteilchenzustandsdichte (QDOS) bis zur Fermienergie gegeben ist (bei $T = 0$ K), werfen wir zur Klärung dieser Frage zunächst einen Blick auf die QDOS. In Abbildung 2.12 ist jeweils die Up- und Down-Elektron-QDOS der verschiedenen Phasen für zwei unterschiedliche Kopplungen $J = 0.1/1.0$ eV gezeigt. Das Hopping t ist so gewählt, dass die freie Bandbreite (bei $J = 0$ eV) $W = 1$ eV beträgt, und das lokale magnetische Moment hat die



Abbildungung 2.12: Up- und Down-Quasiteilchenzustandsdichte verschiedener magnetischer Konfigurationen für zwei Kopplungsstärken J . Parameter: $S = \frac{3}{2}$ und $W = 1.0$ eV.

maximale Projektionsquantenzahl $S = \frac{3}{2}$. Man erkennt sofort die Molekularfeld-Aufspaltung $\Delta_{\text{MF}} = JS$ eV der Up- und Down-Bänder. Es fällt insbesondere bei großen J ($J = 1$ eV, rote Linie) auf, dass die Bandbreite der magnetischen Teilbänder von FM über A-AFM, C-AFM bis G-AFM immer kleiner wird. Gleichzeitig nimmt in dieser Reihenfolge die Anzahl der entgegengesetzt ausgerichteten lokalen Spins auf benachbarten Plätzen eines (Up-) Gitterplatzes zu. Dies führt zu einer effektiven Beschränkung der Bewegungsfreiheit der (Up-)Elektronen. So liegt zum Beispiel beim A-AFM-Typ in der Ebene eine ferromagnetische Ordnung vor und das Elektron kann sich in dieser frei bewegen. Benachbarte Ebenen sind dagegen antiferromagnetisch geordnet und ein Elektron muss die Energiebarriere: Δ_{MF} überwinden, um sich senkrecht zu den Ebenen zu bewegen. Für große J nimmt die Up-QDOS daher die Form der Tight-Binding-Zustandsdichte des quadratischen Gitters an. Dieser Trend setzt sich beim C-AFM-Typ fort, bei dem sich die Elektronen nur noch auf einer linearen Kette frei bewegen können und die Up-QDOS nähert sich für große J der Zustandsdichte einer eindimensionalen Tight-Binding-Dispersion an. Beim G-AFM-Typ sind schließlich alle Nachbarplätze mit einer Energiestrafe belegt und ein Up-Elektron wird für sehr große J an einem Gitterplatz mit lokalem Up-Spin lokalisiert sein, d.h. die Bandbreite wird sehr schmal. Dieser Bandbreiteneffekt ist die Ursache für die erhaltene Abfolge der magnetischen Phasen.

Da die untere Bandkante der FM-Up-QDOS immer bei der tiefsten Energie liegt, wird sich für diese zumindest bei kleinen Bandbesetzungen n auch immer die niedrigste innere Energie ergeben. Da aber die oberen Bandkanten der Up-Bänder mit zunehmender Anzahl entgegengesetzt ausgerichteter Nachbarspins bei immer kleineren Energien liegen, können diese Konfigurationen mit steigender Bandbesetzung eine niedrigere innere Energie besitzen.

Das der n -Bereich, in dem Ferromagnetismus vorliegt, mit steigendem J immer größer wird, ist auf den zunehmenden relativen Gewinn an kinetischer Energie in dieser Phase im Vergleich zu den bewegungsbeschränkenden antiferromagnetischen Phasen zurückzuführen.

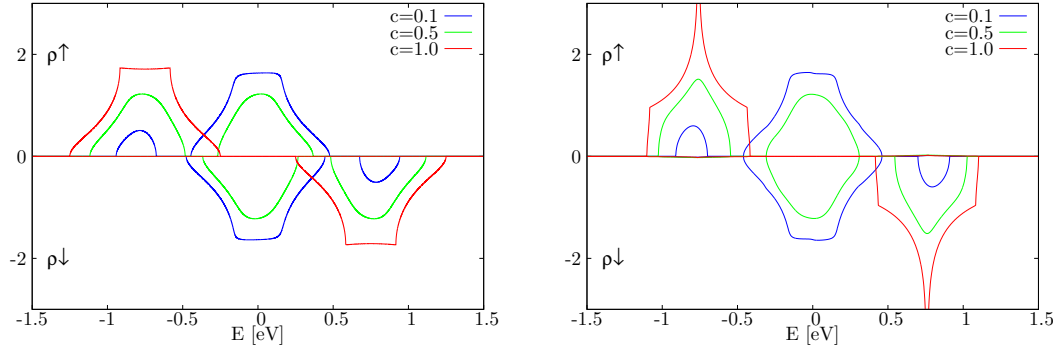
Die paramagnetische Phase tritt für kein $|J| > 0$ eV auf¹², da die ferromagnetische Phase durch die Verschiebung des Up-Spektrums zu kleineren Energien stets eine geringere innere Energie besitzt. Dieses Ergebnis kann allerdings auch als ein Artefakt der einfachen Molekularfeld-Näherung interpretiert werden, da diese keinerlei Korrelationseffekte in der paramagnetischen QDOS zeigt, so als gäbe es keine Wechselwirkung zwischen den frei beweglichen Ladungsträgern und den lokalen Momenten. Tatsächlich zeigen aufwendigere Näherungen für die Selbstenergie deutliche Korrelationseffekte in der paramagnetischen QDOS [105, 90, 124]. Das in [141] mit Hilfe eines Momente erhaltenden Entkopplungsansatzes (D-MCDA) berechnete Phasendiagramm zeigt in der Tat das Auftauchen der paramagnetischen Phase in einem schmalen Streifen zwischen A- und G-Phase für J größer als $J \approx 0.7$ eV. Darüber hinaus sind die Phasendiagramme für $J > 0$ und $J < 0$ nicht mehr symmetrisch, sondern das $J < 0$ Diagramm erscheint im Vergleich zu dem $J > 0$ Diagramm gestaucht. Die Ursache liegt in dem in der D-MCDA auftauchenden Polaronband, das bei $J < 0$ die tiefsten (besetzten) Energiezustände liefert. Wir hatten im Kapitel zum magnetischen Polaron abgeleitet, dass der Bandschwerpunkt dieses Bandes bei $E_P \approx \frac{J}{2}(S+1)$ eV liegt. Dies ergibt im Vergleich zur Molekularfeld-Näherung eine höhere effektive Kopplung $J_{\text{eff}} = J(1 + \frac{1}{S})$, die für das gestauchte Phasendiagramm verantwortlich ist. Man erkennt an der Korrekturformel aber auch, dass der Effekt mit steigender Spinquantenzahl S schnell kleiner wird.

Abgesehen von den eben besprochenen Korrelationseffekten liefert die Molekularfeld-Näherung aber schon ein erstaunlich gutes Bild des $T = 0$ K Phasendiagramms insbesondere für $J > 0$ eV bzw. $S \gg 1$.

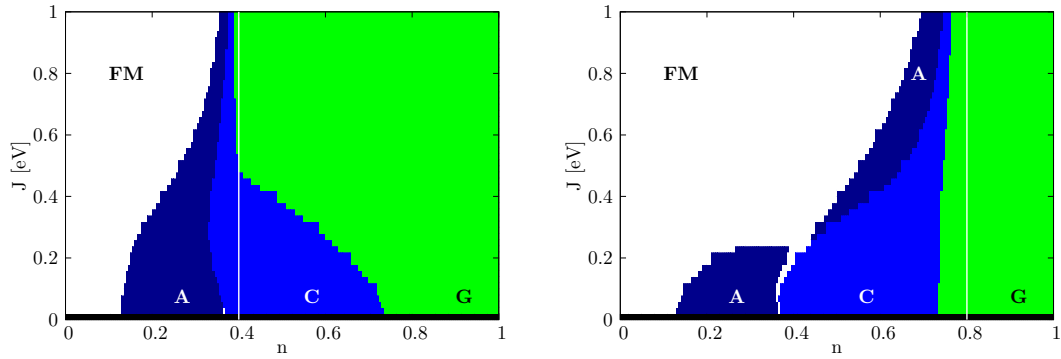
2.3.4 Ergebnisse für das verdünnte System

In Abbildung 2.13 sind die Quasiteilchenzustandsdichten für zwei verschiedene magnetische Konfigurationen bei verschiedenen Konzentrationen c von lokalen Momenten im System dargestellt. Ist $c = 1$, so ergibt sich wieder das schon bekannte Bild der molekularfeldaufgespaltenen magnetischen Subbänder. Im verdünnten System $c < 1$ tauchen zwei neue Teilbänder um $E \approx 0$ eV auf, die unkorrelierten Bänder, die von den Gitterplätzen ohne lokalem magnetischem Moment herrühren. Die unkorrelierten Bänder nehmen mit abnehmender Konzentration unabhängig von der magnetischen Konfiguration immer mehr die Form der freien, einfach-kubischen Tight-Binding-Zustandsdichte an. Die leichte Verschiebung des unkorrelierten Up-Bandes zu höheren Energien und des Down-Bandes zu niedrigeren Energien ist ein Abstoßungseffekt auf Grund von Hybridisierung mit den korrelierten (magnetischen) Bändern, der mit sinkender Konzentration c abnimmt. Das spektrale Gewicht der korrelierten Teilbänder verringert sich proportional zu c . Mit steigender Bandfüllung n wird bei großen J zuerst das magnetische Up-Teilband aufgefüllt und zwar gemäß seines spektralen Gewichts bis zu einer Bandfüllung $n = c$. Führen wir ei-

¹²In der Molekularfeld-Näherung führen $J > 0$ und $J < 0$ zu identischen Phasendiagrammen, lediglich Up- und Down-Spektrum der Elektronen sind vertauscht.



Abbildungung 2.13: Linke Abbildung: QDOS der ferromagnetischen Phase für drei Konzentrationen c der lokalen magnetischen Momente im System. Rechte Abbildung: QDOS der A-AFM-Phase. Parameter: $S = \frac{3}{2}$, $J = 1.0$ eV und $W = 1.0$ eV.



Abbildungung 2.14: MF-CPA-Phasendiagramm für zwei verschiedene Konzentrationen c der lokalen Momente. Linke Abbildung: $c = 0.4$, rechte Abbildung: $c = 0.8$. Parameter: $S = \frac{3}{2}$ und $W = 1.0$ eV.

ne effektive Bandfüllung $n_{\text{eff}} = \frac{n}{c}$ ein, so bekommen wir für große J eine Abfolge der Phasen in n_{eff} , die der des konzentrierten Systems (als Funktion von n) gleicht. Insbesondere liegt bei $n = c$ immer der G-AFM-Typ vor. Dies ist in Abbildung 2.14 für zwei verschiedene Konzentrationen c dargestellt. Wird das System weiter mit Elektronen gefüllt ($n_{\text{eff}} > 1$), so ändert sich die Phase nicht mehr, da ab dem Punkt $n = c$ nur noch die unkorrelierten Bänder aufgefüllt werden, die für alle magnetischen Konfigurationen annähernd dieselbe Form haben. Im Falle kleinerer Kopplungsstärken J wandern die korrelierten Bänder teilweise in die unkorrelierten Bänder. In diesem Fall werden schon bei niedrigeren Bandfüllungen die unkorrelierten Plätze mit Elektronen besetzt und die effektive Füllung der korrelierten Bänder ist entsprechend kleiner als $\frac{n}{c}$. Es ergibt sich dann jeweils die Phase der aktuellen effektiven Füllung. Bei sehr kleinen J nimmt die Abfolge der Phasen einen universellen Charakter an, d.h. sie ist nicht mehr abhängig von der Konzentration der lokalen Momente. So findet man für alle c bei kleinen J FM im Bereich $n \lesssim 0.15$, A-AFM im Bereich $0.15 \lesssim n \lesssim 0.35$, C-AFM im Bereich $0.35 \lesssim n \lesssim 0.75$ und G-AFM im Bereich $0.75 \lesssim n$. Dieses interessante Ergebnis erklärt sich aus der Tatsache, das

2 Das Kondogittermodell

sich bei kleinen J die lokalen Potentiale der beiden Legierungskomponenten kaum noch voneinander unterscheiden. In diesem Fall kann die Methode des virtuellen Kristalls (englisch: virtual crystal approximation (VCA)) [101] zur Lösung des Unordnungsproblems benutzt werden. Diese besteht aus einer bloßen Reskalierung der Kopplungskonstante mit der Konzentration $J_{\text{VCA}} = cJ$. Da sich das Phasendiagramm bei kleinen J aber kaum noch ändert, hat diese Reskalierung keinen Einfluss auf die Abfolge der Phasen.

3 Das Hubbardmodell

3.1 Einleitung

Bandferromagnetismus, wie er in den prototypischen Metallen Eisen, Cobalt und Nickel auftritt, hat seine Ursache in den permanenten magnetischen Momenten (Spin) der Elektronen, die sich im teilweise gefüllten $3d$ -Leitungsband dieser Übergangsmetalle befinden [17]. Die quantenmechanische Beschreibung von Bandferromagnetismus gehört zu den fundamentalsten und gleichzeitig kompliziertesten Vielteilchen-Problemen der Festkörperphysik [152].

Es kann erwartet werden, dass sich die Entstehung einer kollektiven Ordnung aus dem Wechselspiel der spinunabhängigen Coulombwechselwirkung (die stark ist, in Metallen aber abgeschirmt wird) und der kinetischen Energie der Elektronen erklärt, die zusätzlich dem Pauliprinzip unterliegen. Ein minimales Modell zur Beschreibung dieser Aspekte wurde unabhängig von Hubbard [63], Kanamori [71] und Gutzwiller [44] vorgeschlagen. Der Hamiltonoperator des Hubbardmodells ist durch

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij}t_0) c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \frac{B}{2} \sum_{i\sigma} e^{-i\mathbf{R}_i \mathbf{K}} \hat{n}_{i\sigma} \quad (3.1)$$

gegeben. Der erste Term beschreibt das Hüpfen der Elektronen durch das Gitter. Die Hoppingintegrale t_{ij} werden in dieser Arbeit durchgehend nur für nächste Nachbarn von Null verschieden angenommen. Insbesondere ist $t_{ii} = 0$, da der Bandschwerpunkt t_0 explizit aus dem Hoppingterm herausgezogen wurde. Der zweite Term beschreibt die lokale Coulombabstoßung ($U \geq 0$) zweier Elektronen am selben Gitterplatz, wobei $\hat{n}_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ den lokalen Besetzungszahloperator bezeichnet. Der dritte Term stellt einen verallgemeinerten Feld-Term dar. Wenn $\mathbf{K} = 0$ gewählt wird, hat man einfach ein homogenes magnetisches Feld B in z -Richtung. Wenn $\mathbf{K} \neq 0$ gilt, können auch kompliziertere, lokal unterschiedliche Feldkonfigurationen erreicht werden (englisch: staggered field). Aus Gründen der Hermitezität muss dabei das Produkt $(\mathbf{R}_i \mathbf{K})$ ein Vielfaches von π ergeben.

Trotz der scheinbar einfachen Gestalt des Hamiltonoperators (3.1), stellt das Hubbardmodell ein im Allgemeinen nicht lösbares Vielteilchen-Problem dar. Es war darum für das Verständnis der Korrelationseffekte im Hubbardmodell von großer Bedeutung zu erkennen, dass sich dieses im Grenzfall unendlicher Gitterdimension auf ein Single-Impurity-Andersonmodell (SIAM) abbilden lässt [37, 38]. Diese, als *Dynamische Molekularfeldtheorie* (DMFT) bekannte Methode, erlaubt im Prinzip die exakte Lösung des unendlichdimensionalen Hubbardmodells, da das SIAM numerisch z.B. durch Quanten-Monte-Carlo-Verfahren gelöst werden kann [42].

Als (approximative) Lösung für das endlichdimensionale Hubbardmodell hat die sonst sehr erfolgreiche DMFT den Nachteil, dass die resultierende elektronische Selbstenergie unabhängig von der Wellenzahl ist (die Selbstenergie ist lokal) – eine Eigenschaft, die nur für $d = \infty$ exakt gilt [89, 93]. Es erscheint zum Beispiel

fragwürdig, ob die DMFT in der Lage ist, winkelaufgelöste Photoemissionsexperimente korrekt zu beschreiben. Es gibt darum in der neueren Forschung Versuche, die DMFT um nichtlokale Korrelationseffekte zu erweitern [86, 145, 120, 118, 32]. Daneben existieren aber auch andere theoretische Zugänge zur Problematik der Nichtlokalität der Selbstenergie in niedrigen Dimensionen $d = 2, 3$. Für den Bereich schwacher Coulombabstoßung entwickelten Schweitzer und Czycholl eine Methode, um die aufwendigen Wellenzahlsummationen, die bereits in zweiter Ordnung diagrammatischer Störungstheorie auftauchen, durchzuführen [132]. Kakehashi und Fulde nutzten den Mori-Formalismus in Kombination mit der „coherent potential approximation“ (CPA), um die Ein-Teilchen-Anregungen des Hubbardmodells im Rahmen einer nichtlokalen Theorie zu beschreiben [70].

Zur Existenz einer ferromagnetischen Phase im Hubbardmodell gibt es nur wenige exakte Aussagen. Das Nagaoka-Theorem besagt, dass eine gesättigte ferromagnetische Phase im Grenzfall $U \rightarrow \infty$ den Grundzustand im dreidimensionalen (3D), einfach-kubischen Gitter bildet, wenn ein Elektron bzw. Loch in das halbgefüllte Band eingebracht wird [95]. Das Mermin-Wagner-Theorem schließt ferromagnetische und antiferromagnetische Ordnung im Hubbardmodell bei endlichen Temperaturen für Gitterdimensionen $d \leq 2$ aus [87, 154, 39, 35, 36]. Für das unendlichdimensionale Hubbardmodell auf einem einfach-hyperkubischen bzw. flächenzentrierten Gitter wurde die Existenz einer ferromagnetischen Phase durch DMFT-Rechnungen bewiesen [106, 148, 164].

Diese exakten Ergebnisse können nun benutzt werden, um Aussagen, die mit approximativen Theorien gewonnen wurden, zu überprüfen.

Eine Vielzahl von Arbeiten haben die Möglichkeit einer ferromagnetischen Phase im Hubbardmodell mit approximativen Theorien untersucht. DMFT-Rechnungen für das einfach-kubische und kubisch-flächenzentrierte Gitter wurden in [148, 129] durchgeführt und der Einfluss von Hopping zu übernächsten Nachbarn wurde in [111] untersucht. Ferromagnetismus und Antiferromagnetismus für verschiedene 3D-Gittertypen wurde mit einer Spektraldichteansatz-Selbstenergie in [102, 54, 55] untersucht. Variationsverfahren wurden in [29, 45, 43] verwendet.

Aus diesen Rechnungen kann ein genereller Trend ermittelt werden. Zwei Aspekte scheinen Ferromagnetismus im Hubbardmodell zu unterstützen. Das ist zum einen eine asymmetrische Zustandsdichte, wie man sie z.B. im kubisch-flächenzentrierten Gitter findet. Zum anderen sind das Gitter, die sich nicht „zweiteilen“ lassen in dem Sinne, dass jeder Hoppingprozess auf das jeweils andere Untergitter führt. Das kann z.B. durch Einführung eines Hoppings zu übernächsten Nachbarn erreicht werden. In diesen Gittern sind antiferromagnetische Korrelationen durch Frustration unterdrückt. Daraus kann gefolgert werden, dass Ferro- und Antiferromagnetismus im Hubbardmodell miteinander konkurrieren.

In dieser Arbeit soll der Einfluss nichtlokaler Korrelationen auf die Ausbildung einer ferromagnetischen Phase im einfach-kubischen Gitter untersucht werden. Dazu werden zunächst in Kapitel 3.2 einige schon bekannte Grundlagen zum Hubbardmodell rekapituliert, die notwendig sind, um die an späterer Stelle entwickelte approximative Theorie und die daraus folgenden Ergebnisse richtig zu bewerten. Als Erstes wiederholen wir den Beweis des Mermin-Wagner-Theorems für das Hubbardmodell, da die Erfüllung dieses Theorems eines der zentralen Resultate dieser Arbeit darstellen wird.

Daran anschließend wird der Grenzfall des unendlich schmalen Bandes besprochen, einer der wenigen exakt lösbaren Grenzfälle des Hubbardmodells. Aus diesem lässt sich dann eine erste Abschätzung der spektralen Eigenschaften des Hubbardmodells im Bereich starker Kopplung und schmaler Bandbreite ($U \gg W$) gewinnen. Um diesen Bereich genauer zu analysieren, werden wir dann einen effektiven Hamiltonoperator, der einer Entwicklung in Potenzen von $1/U$ entspricht, ableiten. Aus diesem können dann die spektralen Eigenschaften des Hubbardmodells im Bereich $U \gg W$ in systematischer Weise abgeleitet werden.

Zum Abschluss des Grundlagenteils wird noch der Grenzfall des unendlichdimensionalen Hubbardmodells besprochen.

Auf den Grundlagenteil folgt dann ein Kapitel (Kapitel 3.3), in dem Näherungsverfahren zur approximativen Lösung des Hubbardmodells vorgestellt werden. Der Spektraldichteansatz (SDA) liefert Anregungsenergien, die für große U in Einklang mit der $1/U$ Entwicklung aus dem Grundlagenkapitel stehen. Die SDA-Selbstenergie ist allerdings reell und enthält somit keinerlei Lebensdauereffekte, die auf Grund von Elektron-Elektron-Streuung in jedem Fall zu erwarten sind. Lebensdauereffekte ergeben sich dagegen in der danach vorgestellten diagrammatischen Störungstheorie zweiter Ordnung (englisch: second order perturbation theory (SOPT)) auf natürliche Weise. Die SOPT hat aber den Nachteil, bedingt durch ihre Konstruktion, nur für kleine U verlässliche Resultate zu liefern.

Die daran anschließend für das Hubbardmodell neu entwickelte, nichtlokale modifizierte Störungstheorie (MPT) wird sich gewissermaßen als eine Vereinigung aus SDA und SOPT herausstellen in dem Sinne, dass sie sowohl Elemente schwacher als auch starker Wechselwirkung enthält.

Im Kapitel 3.4 wird die statische paramagnetische Suszeptibilität abgeleitet, die als ein Werkzeug zur Auffindung von Phasengrenzen eines potentiellen ferromagnetischen Phasenübergangs dienen kann. Daneben wird eine Formel für die optische Leitfähigkeit aus dem Ein-Schleifen-Beitrag einer diagrammatischen Entwicklung abgeleitet und einige interessante Aspekte dieser diskutiert.

Der dann folgende Ergebnisteil (3.5) beginnt mit einem Vergleich der verschiedenen vorgestellten Näherungsverfahren. Daran anschließend folgt eine ausführliche Diskussion der spektralen Eigenschaften des zwei- und dreidimensionalen Hubbardmodells, wie sie sich aus der voll wellenzahlabhängigen MPT-Selbstenergie ergeben. Nach der Diskussion der Leitfähigkeit im dreidimensionalen Gitter wird am Schluss des Ergebnisteils die Möglichkeit eines ferromagnetischen Phasenübergangs und die Auswirkungen der Nichtlokalität der Selbstenergie auf diesen besprochen.

3.2 Grundlagen – exakte Aussagen

3.2.1 Das Mermin-Wagner-Theorem

Mermin und Wagner zeigten in ihrer grundlegenden Arbeit [87] die Unmöglichkeit eines ferromagnetischen oder antiferromagnetischen Phasenübergangs im ein- und zweidimensionalen Heisenbergmodell bei endlichen Temperaturen. Wenig später übertrugen Walker und Ruijgrok [154] und auf anderem Wege Ghosh [39] dieses Ergebnis auf das Hubbardmodell, für das es in ein und zwei Dimensionen ebenfalls keinen solchen Phasenübergang geben kann. Wegen der Wichtigkeit dieser Aussage, die eine der wenigen exakt bekannten Tatsachen zum Hubbardmodell darstellt, möchte ich die Beweisführung an dieser Stelle wiederholen.

Ausgangspunkt ist die Bogoliubov-Ungleichung

$$|\langle [C, A]_- \rangle|^2 \leq \frac{\beta}{2} \langle [A, A^+]_+ \rangle \langle [[C, \mathcal{H}]_-, C^+]_- \rangle, \quad (3.2)$$

deren Beweis sich zum Beispiel in [101] findet. A und C sind beliebige Operatoren, \mathcal{H} der Hamiltonoperator und $\langle \dots \rangle$ bezeichnet die thermodynamische Mittlung. Die Idee für einen Beweis des Theorems besteht nun darin, passende Operatoren für A und C zu finden, sodass (3.2) eine obere Schranke des Ordnungsparameters liefert. Im Falle des Hubbardmodells (3.1) ist der Ordnungsparameter durch

$$M_{\mathbf{K}} = \frac{1}{N} \sum_i e^{-i\mathbf{R}_i \mathbf{K}} \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle \quad (3.3)$$

gegeben. Es wird sich herausstellen, dass die folgende Wahl zum Ziel führt:

$$\begin{aligned} A &= \hat{\sigma}_{-\mathbf{k}-\mathbf{K}}^- = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i(-\mathbf{k}-\mathbf{K})\mathbf{R}_i} c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow}, \\ C &= \hat{\sigma}_{\mathbf{K}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_i} c_{i\uparrow}^+ c_{i\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

In der Tat ergibt die linke Seite der Bogoliubov-Ungleichung mit dieser Wahl der Operatoren

$$|\langle [C, A]_- \rangle|^2 = \left| \frac{1}{N} \sum_i 2e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_i} \langle \hat{\sigma}_i^z \rangle \right|^2 = 4|M_{\mathbf{K}}|^2. \quad (3.5)$$

Die Auswertung des zweiten Erwartungswertes auf der rechten Seite von (3.2) ergibt

$$\begin{aligned} \langle [[C, \mathcal{H}]_-, C^+]_- \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}} - \epsilon_{\mathbf{q}}) \langle \hat{n}_{\mathbf{q}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{q}\downarrow} \rangle + 2BM_{\mathbf{K}} \\ &\leq \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{K}} - \epsilon_{\mathbf{q}}) \langle \hat{n}_{\mathbf{q}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{q}\downarrow} \rangle + 2|BM_{\mathbf{K}}|. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Den ersten Term der rechten Seite kann man wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} (\epsilon_{\mathbf{q}-\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{q}}) \langle \hat{n}_{\mathbf{q}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{q}\downarrow} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_i t_{0i} (e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} - 1) \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}_i} \langle \hat{n}_{\mathbf{q}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{q}\downarrow} \rangle \\
 &\leq \frac{1}{N} \sum_i |t_{0i}| (1 - \cos \mathbf{k}\mathbf{R}_i) \sum_{\mathbf{q}} |\langle \hat{n}_{\mathbf{q}\uparrow} + \hat{n}_{\mathbf{q}\downarrow} \rangle| \\
 &\leq 2 \sum_i |t_{0i}| (1 - \cos \mathbf{k}\mathbf{R}_i) \\
 &\leq \sum_i |t_{0i}| (\mathbf{k}\mathbf{R}_i)^2,
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

wobei wir im ersten Schritt Inversionssymmetrie der Hoppingparameter t_{0i} und die Dreiecksungleichung benutzt haben. Setzen wir dieses Ergebnis in (3.6) ein und teilen in (3.2) durch den resultierenden Ausdruck, so erhalten wir

$$\frac{4|M_{\mathbf{K}}|^2}{\sum_i |t_{0i}| (\mathbf{k}\mathbf{R}_i)^2 + 2|BM_{\mathbf{K}}|} \leq \frac{\beta}{2} \langle [\hat{\sigma}_{-\mathbf{k}-\mathbf{K}}^-, \hat{\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}^+]_+ \rangle. \tag{3.8}$$

Nun summieren wir auf beiden Seiten über den Wellenzahlvektor \mathbf{k} . Das ergibt auf der rechten Seite:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle [\hat{\sigma}_{-\mathbf{k}-\mathbf{K}}^-, \hat{\sigma}_{\mathbf{k}+\mathbf{K}}^+]_+ \rangle &= \frac{1}{N^2} \sum_{ij\mathbf{k}} e^{i((-\mathbf{k}-\mathbf{K})\mathbf{R}_i + (\mathbf{k}+\mathbf{K})\mathbf{R}_j)} \langle [c_{i\downarrow}^+ c_{i\uparrow}, c_{j\uparrow}^+ c_{j\downarrow}]_+ \rangle \\
 &= \frac{1}{N} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} (1 - \hat{n}_{i\downarrow}) + \hat{n}_{i\downarrow} (1 - \hat{n}_{i\uparrow}) \rangle \\
 &\leq 2.
 \end{aligned} \tag{3.9}$$

Stellen wir mit diesem Ergebnis die \mathbf{k} -summierte Ungleichung (3.8) noch ein wenig um, so erhalten wir:

$$4|M_{\mathbf{K}}|^2 \leq \beta \left[\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sum_i |t_{0i}| R_i^2 k^2 + 2|BM_{\mathbf{K}}|} \right]^{-1}. \tag{3.10}$$

Im thermodynamischen Limes ($N \rightarrow \infty$, n const.) kann die Wellenzahlsumme durch ein Integral über die erste Brillouinzone ersetzt werden:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k. \tag{3.11}$$

Da der Integrand stets positiv ist, wird die Ungleichung nicht verletzt, wenn das Integral auf eine d -dimensionale Kugel, die komplett innerhalb der Brillouinzone liegen möge und deren Radius k_0 sei, reduziert wird. Der Winkelanteil des Integrals kann sofort ausgeführt werden und es verbleibt:

$$4|M_{\mathbf{K}}|^2 \leq \beta \left[\frac{2\sqrt{\pi}^d}{(2\pi)^d \Gamma(\frac{d}{2})} \int_{k=0}^{k_0} dk k^{d-1} \frac{1}{\sum_i |t_{0i}| R_i^2 k^2 + 2|BM_{\mathbf{K}}|} \right]^{-1}. \tag{3.12}$$

3 Das Hubbardmodell

Das verbleibende Integral kann elementar gelöst werden. Mit der Definition

$$C_1 = \sum_i |t_{0i}| R_i^2 \quad (3.13)$$

ergibt sich im Fall des eindimensionalen Gitters

$$\int_{k=0}^{k_0} dk \frac{1}{C_1 k^2 + 2|BM_{\mathbf{K}}|} = \frac{\arctan\left(\sqrt{\frac{C_1}{2|BM_{\mathbf{K}}|}} k_0\right)}{\sqrt{C_1|BM_{\mathbf{K}}|}}. \quad (3.14)$$

Dieser Ausdruck divergiert, wenn man das äußere Feld B gegen null streben läßt und die Ungleichung (3.12) erzwingt, dass der Ordnungsparameter bei endlichen Temperaturen (β ist endlich) ohne Feld immer gleich null ist. Damit ist bewiesen, dass es im eindimensionalen Hubbardmodell keine magnetische Ordnung (ferromagnetisch oder antiferromagnetisch) geben kann.

Im zweidimensionalen Gitter ergibt sich:

$$\int_{k=0}^{k_0} dk k \frac{1}{C_1 k^2 + 2|BM_{\mathbf{K}}|} = \frac{\ln\left(1 + \frac{C_1}{2|BM_{\mathbf{K}}|} k_0^2\right)}{2C_1}. \quad (3.15)$$

Auch dieser Ausdruck divergiert für $B \rightarrow 0$. Damit haben wir eine magnetische Ordnung auch im zweidimensionalen Hubbardmodell ausgeschlossen.

Man beachte aber, dass die implizite Annahme gemacht wurde, dass C_1 (3.13) nicht divergiert, das Hopping also schnell genug mit dem Abstand abfällt.

Dieser Beweis kann auf Schichtsysteme mit einer endlichen Anzahl von (zweidimensionalen) Lagen ausgedehnt werden, wie in [35, 36] gezeigt wird. Im dreidimensionalen Gitter ergibt das Integral für $B \rightarrow 0$ einen endlichen Wert. Somit können in diesem Fall magnetische Phasenübergänge bei endlichen Temperaturen nicht ausgeschlossen werden.

3.2.2 Das unendlich schmale Band

Die Schwierigkeiten bei der Behandlung des Hubbardmodells resultieren aus dem komplizierten Wechselspiel von lokaler Coulombwechselwirkung und nichtlokalem Hopping der Elektronen. Um dies besser zu veranschaulichen, schreiben wir zunächst den ursprünglichen Hamiltonoperator (3.1) ein wenig um:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= T + UV + H_B = T_0 + T_{-1} + T_1 + UV + H_B \\ &= \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} t_0) \left(n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} n_{j-\sigma} + (1 - n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) \right) \\ &\quad + \sum_{ij\sigma} t_{ij} (1 - n_{i-\sigma}) c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} n_{j-\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} n_{i-\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} (1 - n_{j-\sigma}) \\ &\quad + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \frac{B}{2} \sum_{i\sigma} z_{\sigma} n_{i\sigma}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

wobei ein homogenes Magnetfeld ($\mathbf{K} = \mathbf{0}$) angenommen wurde. Die Hoppingparameter t_{ij} sind nur für $i \neq j$ von null verschieden. Die Terme T_p beschreiben dann

Hoppingprozesse der Elektronen, bei denen sich die Anzahl der doppelt besetzten Gitterplätze um eins erhöht ($p = 1$) um eins erniedrigt ($p = -1$) oder gleich bleibt ($p = 0$). Der Operator $V = \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$ „zählt“ die Plätze, auf denen eine Doppelbesetzung mit Elektronen vorliegt. Es ist dann unmittelbar klar, dass der Operator V nicht mit den Operatoren T_p ; $p \neq 0$ vertauschen wird. Es gelten vielmehr die Vertauschungsrelationen

$$[V, T_p]_- = pT_p, [V, H_B]_- = [T_p, H_B]_- = 0. \quad (3.17)$$

Diese Nichtvertauschbarkeit von Hoppingtermen und lokaler Wechselwirkung stellt das Kernproblem des Hubbardmodells dar.

Ein lösbarer Grenzfall des Modells ergibt sich, wenn man das Hopping ausschaltet ($t_{ij} \rightarrow 0$) bzw. ($W \rightarrow 0$), wobei W die freie Bandbreite bezeichnet. Jede beliebige Verteilung der Elektronen auf die Gitterplätze unter Beachtung des Pauliprinzipis stellt dann einen Eigenzustand des Hamiltonoperators dar und seine Eigenenergie ist durch die Anzahl der doppelt besetzten Gitterplätze und der Differenz der Anzahl von Up- und Down-Elektronen¹ festgelegt.

Um die Ein-Teilchen-Anregungen des Systems im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes zu studieren, wollen wir nun die Ein-Elektronen-Greenfunktion bestimmen. Die Bewegungsgleichung der Greenfunktion lautet:

$$(E + \mu - t_0 + z_\sigma \frac{B}{2}) G_{ij\sigma} = \delta_{ij} + U \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle. \quad (3.18)$$

Auf der rechten Seite von (3.18) taucht eine höhere Greenfunktion auf, für die wir ebenfalls die Bewegungsgleichung aufstellen:

$$(E + \mu - t_0 + z_\sigma \frac{B}{2} - U) \langle\langle n_{i-\sigma} c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle = \delta_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle. \quad (3.19)$$

Löst man diese Gleichung nach der höheren Greenfunktion auf und setzt das Ergebnis in (3.18) ein, so erhält man für die elektronische Greenfunktion:

$$G_{ij\sigma}^{W \rightarrow 0}(E) = \delta_{ij} \left(\frac{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle}{E + \mu - t_0 + z_\sigma \frac{B}{2}} + \frac{\langle n_{-\sigma} \rangle}{E + \mu - t_0 + z_\sigma \frac{B}{2} - U} \right). \quad (3.20)$$

Daraus kann durch einfache Umformungen die elektronische Selbstenergie² abgeleitet werden:

$$\Sigma_\sigma(E) = -z_\sigma \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{E + \mu - t_0 + z_\sigma \frac{B}{2} - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}. \quad (3.21)$$

Die Anregungsenergien ergeben sich aus den Polen der Greenfunktion zu:

$$E_\sigma^{(0)} = t_0 - z_\sigma \frac{B}{2}, \quad E_\sigma^{(1)} = t_0 - z_\sigma \frac{B}{2} + U. \quad (3.22)$$

Ein Elektron mit Spin σ , das in das System eingebracht wird, kann auf einem leeren Gitterplatz landen und hat dann die Energie $E_\sigma^{(0)}$, oder es befindet sich schon

¹Diese Abhängigkeit gibt es nur für $B \neq 0$.

²Die Definition der elektronischen Selbstenergie findet sich im Anhangskapitel 5.

ein Elektron entgegengesetzten Spins auf diesem Gitterplatz und das Elektron erfährt zusätzlich die Coulombabstoßung U . Die Wahrscheinlichkeit für den einen oder anderen Fall ist durch die spektralen Gewichte:

$$\alpha_{\sigma}^{(0)} = 1 - \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad \alpha_{\sigma}^{(1)} = \langle n_{-\sigma} \rangle \quad (3.23)$$

gegeben. Dementsprechend ist die Spektraldichte, deren Definition sich im Anhang (150) findet, durch zwei Deltafunktionen bei den Anregungsenergien $E_{\sigma}^{(0/1)}$, gewichtet mit den spektralen Gewichten $\alpha_{\sigma}^{(0/1)}$, gegeben.

Wie ändert sich nun das Anregungsspektrum bei endlichem Hopping t_{ij} ? Erste Hinweise zur Beantwortung dieser Frage lassen sich aus der Berechnung des Anregungsspektrums endlicher Cluster, wie sie analytisch in [46, 58, 103] für ein Zweiplatz-Modell und numerisch in [16] für größere Cluster durchgeführt wurde, gewinnen. Es ergibt sich folgendes Bild. Die entarteten Quasiteilchenniveaus (3.22) spalten unter der Wirkung von Hoppingprozessen auf. Für $W \ll U$ bilden die aufgespaltenen Niveaus zwei Gruppen, die durch ein Mott-Gap getrennt sind und die um die ursprünglichen Energien zentriert sind. Das spektrale Gewicht dieser Gruppen erfährt im Vergleich zu den Werten des atomaren Limes (3.23) eine Korrektur.

Bevor wir eine genauere Analyse der spektralen Eigenschaften des Hubbardmodells im Bereich starker Kopplung durchführen werden, wollen wir im nächsten Abschnitt einen effektiven Hamiltonoperator für den Grenzfall $W \ll U$ ableiten.

3.2.3 Der Bereich starker Kopplung und schmaler Bandbreite

Im letzten Kapitel haben wir gesehen, dass die Schwierigkeiten bei der Behandlung des Hubbardmodells von den Termen herrühren, die die Anzahl der doppelt besetzten Gitterplätze ändern³. Es ist darum naheliegend zu fragen, ob sich eine unitäre Transformation des Hilbertraums der Elektronen finden lässt, die die problematischen Hoppingprozesse eliminiert. Eine allgemeine unitäre Transformation lässt sich wie folgt darstellen:

$$|\tilde{\Psi}\rangle = U|\Psi\rangle = e^{-iS}|\Psi\rangle, \quad (3.24)$$

wobei S einen selbstadjungierten Operator bezeichnet. Diese Transformation überträgt sich unmittelbar auf die Operatoren. So hat der Hamiltonoperator im Raum der neuen Zustände die Form

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{H}} &= e^{-iS} \mathcal{H} e^{iS} = \tilde{T} + U\tilde{V} + \tilde{H}_B \\ &= \sum_{ij\sigma} t_{ij} \tilde{c}_{i\sigma}^{\dagger} \tilde{c}_{j\sigma} + U \sum_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} - \frac{B}{2} \sum_{i\sigma} z_{\sigma} \tilde{n}_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Man erkennt, dass die ursprünglichen elektronischen Erzeuger- / Vernichtoperatoren durch neue Quasiteilchenoperatoren $\tilde{c}_{i\sigma}^{(+)}$ ersetzt wurden, die im transformierten Hilbertraum die Rolle der Elektronen übernehmen und demselben Hamiltonoperator wie diese im untransformierten Hilbertraum unterliegen. Zwischen den alten und

³Dies ist natürlich nur eine Frage der Perspektive, ebenso gut könnte man sagen, die Schwierigkeiten rührten von dem Term der Coulombabstoßung her. Wesentlich ist das Wechselspiel dieser beiden Anteile.

den neuen Operatoren besteht der Zusammenhang:

$$\tilde{c}_{i\sigma}^{(+)} = e^{-iS} c_{i\sigma}^{(+)} e^{iS}. \quad (3.26)$$

Über diese Beziehung können wir nun sowohl den ursprünglichen Hamiltonoperator im untransformierten Hilbertraum als auch den Operator S durch die neuen Quasiteilchenoperatoren $\tilde{c}_{i\sigma}^{(+)}$ ausdrücken und die Transformation soll so gewählt werden, dass die neuen Quasiteilchen keine Hoppingprozesse mehr durchführen, die die Zahl der Doppelbesetzungen ändert. Es soll also

$$[\tilde{V}, \mathcal{H}] = 0 \quad (3.27)$$

gelten. Dazu schreiben wir zunächst mit Hilfe der Lie'schen Entwicklungsformel (148)⁴

$$\mathcal{H} = e^{i\tilde{S}} \tilde{\mathcal{H}} e^{-i\tilde{S}} = \tilde{\mathcal{H}} + i[\tilde{S}, \tilde{\mathcal{H}}] - \frac{1}{2}[\tilde{S}, [\tilde{S}, \tilde{\mathcal{H}}]] + \dots \quad (3.28)$$

Mit Hilfe der Vertauschungsrelationen (3.17) erkennt man, dass die Wahl

$$\tilde{S} = \frac{1}{U} \tilde{S}_1 = -i \frac{1}{U} (\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}) \quad (3.29)$$

die Hoppingterme $\tilde{T}_{\pm 1}$ in nullter Ordnung von $1/U$ zum Verschwinden bringt:

$$\mathcal{H}_1 = e^{i\tilde{S}} \tilde{\mathcal{H}} e^{-i\tilde{S}} = U\tilde{V} + \tilde{H}_B + \tilde{T}_0 + \frac{1}{U} ([\tilde{T}_0, \tilde{T}_{-1}] - [\tilde{T}_0, \tilde{T}_1] + [\tilde{T}_1, \tilde{T}_{-1}]) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2. \quad (3.30)$$

In dem so transformierten Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 erscheinen die unerwünschten, nicht doppelbesetzungserhaltenden Hoppingterme in erster Ordnung $1/U$.⁵ Will man die Hoppingterme in höherer Ordnung von $1/U$ eliminieren, so legt die obige Form von \tilde{S} und \mathcal{H}_1 nahe, dass sich der volle Transformationsoperator \tilde{S} als eine Taylorreihe in Potenzen von $1/U$ darstellen lässt:

$$\tilde{S} = \left(\frac{1}{U}\right) \tilde{S}_1 + \left(\frac{1}{U}\right)^2 \tilde{S}_2 + \dots \quad (3.31)$$

Setzt man diese Entwicklung in (3.24) ein und wählt für \tilde{S}_1 den schon gefundenen Ausdruck (3.29), so erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = U\tilde{V} + \tilde{H}_B + \tilde{T}_0 + \left(\frac{1}{U}\right) \left\{ [\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, \tilde{T}] + i[\tilde{S}_2, \tilde{V}] + \frac{1}{2}[\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, \tilde{V}]] \right\} \\ + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Um nun auch alle Terme der Ordnung $1/U$ zum Verschwinden zu bringen, die nicht mit dem Operator \tilde{V} vertauschen, muss folgende Bedingung erfüllt werden,

⁴Die Gleichungsnummern ohne Punkt bezeichnen Gleichungen, die im Anhang zu finden sind.

⁵Genau genommen ist die Ordnung W^2/U . Wir nehmen hier aber an, dass die freie Bandbreite W immer von der Größenordnung ~ 1 ist.

3 Das Hubbardmodell

die gleichzeitig eine Bestimmungsgleichung für \tilde{S}_2 darstellt:

$$\begin{aligned} 0 &\stackrel{!}{=} [\tilde{V}, [\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, \tilde{T}] + \frac{1}{2}[\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, \tilde{V}]] + i[\tilde{S}_2, \tilde{V}] \\ &= [\tilde{V}, [\tilde{T}_0, \tilde{T}_{-1} - \tilde{T}_1] + [\tilde{T}_1, \tilde{T}_{-1}] + i[\tilde{S}_2, \tilde{V}]]. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Da $[\tilde{V}, [\tilde{T}_1, \tilde{T}_{-1}]] = 0$ gilt, ergibt sich

$$i[\tilde{V}, \tilde{S}_2] = [\tilde{T}_0, \tilde{T}_{-1} - \tilde{T}_1]. \quad (3.34)$$

Diese Gleichung kann erfüllt werden, wenn man

$$\tilde{S}_2 = i[\tilde{T}_0, \tilde{T}_1 + \tilde{T}_{-1}] \quad (3.35)$$

wählt. Setzen wir das gefundene \tilde{S}_2 in (3.32) ein, so erhalten wir für die Entwicklung von \mathcal{H} bis zum linearen Glied:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= U\tilde{V} + \tilde{H}_B + \tilde{T}_0 + \left(\frac{1}{U}\right) \left\{ [\tilde{T}_1, \tilde{T}_{-1}] \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2 \\ &= U \sum_i \tilde{n}_{i\uparrow} \tilde{n}_{i\downarrow} + H_B + \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} t_0) \left(\tilde{n}_{i-\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} \tilde{n}_{j-\sigma} + (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \right) \\ &\quad + \left(\frac{1}{U}\right) \sum_{ijl\sigma} t_{il} t_{lj} \left\{ \tilde{n}_{i-\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^+ (1 - \tilde{n}_{l-\sigma}) \tilde{n}_{j-\sigma} \tilde{c}_{j\sigma} - (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{n}_{l\sigma} \tilde{n}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} \right. \\ &\quad \left. - (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ (1 - \tilde{n}_{l\sigma}) \tilde{n}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} + (1 - \tilde{n}_{i\sigma}) \tilde{c}_{i-\sigma}^+ \tilde{c}_{l\sigma} \tilde{c}_{l-\sigma} \tilde{n}_{j-\sigma} \tilde{c}_{j\sigma}^+ \right. \\ &\quad \left. + \tilde{n}_{i-\sigma} \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{l-\sigma}^+ \tilde{n}_{j\sigma} \tilde{c}_{j-\sigma} + (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma} \tilde{c}_{l-\sigma}^+ \tilde{c}_{l\sigma}^+ \tilde{n}_{j\sigma} \tilde{c}_{j-\sigma} \right. \\ &\quad \left. + (1 - \tilde{n}_{i\sigma}) \tilde{c}_{i-\sigma}^+ \tilde{c}_{l\sigma}^+ \tilde{c}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Der so konstruierte (approximative) Hamiltonoperator hat keine Terme mehr, die die Zahl der doppelt besetzten Gitterplätze ändern. Er wurde erstmalig in einer Arbeit von Harris und Lange [46] abgeleitet. Höhere Ordnungen der Entwicklung finden sich in [85]. Eine Entwicklung des Hamiltonoperators in $1/U$ ist allerdings nur bis zur quadratischen Ordnung eindeutig, wie in [19] gezeigt wurde. Geht man über diese Ordnung hinaus, so liefern verschiedene Methoden der Störungstheorie unterschiedliche Hamiltonoperatoren, die aber durch eine kanonische Transformation ineinander überführt werden können [19].

Im Falle einer starken Coulombabstoßung U werden die Elektronen zumindest bei einer Bandfüllung ($n < 1$) versuchen, eine Doppelbesetzung zu vermeiden, d.h. es werden primär Hoppingprozesse über leere Gitterplätze stattfinden. Sammelt man

in (3.36) nur die Terme, die solche Prozesse beschreiben, erhält man:

$$\begin{aligned}
 \tilde{H}_{tJ} &= \sum_{ij\sigma} (t_{ij} + \delta_{ij} t_0) (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \\
 &+ \frac{1}{U} \sum_{ijl\sigma} t_{il} t_{lj} \left\{ -(1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{n}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{l\sigma}) (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} \right. \\
 &\quad \left. + (1 - \tilde{n}_{i\sigma}) \tilde{c}_{i-\sigma}^+ \tilde{c}_{l\sigma}^+ \tilde{c}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} \right\} \\
 &= \sum_{ij} (t_{ij} + \delta_{ij} t_0) (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{c}_{j\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \\
 &+ \frac{2}{U} \sum_{ij\sigma} t_{ij}^2 \left\{ \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j - \frac{1}{4} \sum_{\sigma\sigma'} \tilde{n}_{i\sigma} (1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{n}_{j\sigma'} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma'}) \right\} \\
 &+ \frac{1}{U} \sum_{ilj\sigma}^{i \neq j} t_{il} t_{lj} \left\{ -(1 - \tilde{n}_{i-\sigma}) \tilde{c}_{i\sigma}^+ \tilde{n}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{l\sigma}) (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} \right. \\
 &\quad \left. + (1 - \tilde{n}_{i\sigma}) \tilde{c}_{i-\sigma}^+ \tilde{c}_{l\sigma}^+ \tilde{c}_{l-\sigma} (1 - \tilde{n}_{j-\sigma}) \tilde{c}_{j\sigma} \right\}.
 \end{aligned}$$

Dies ist das sogenannte tJ-Modell, dessen erste Erwähnung sich in [18] findet. Das Interessante an diesem Modell ist, dass es eine nichtlokale Spin-Spin-Wechselwirkung mit der (positiven) Kopplungskonstante:

$$J_{ij} = \frac{2t_{ij}^2}{U} \quad (3.37)$$

enthält. Die Spinoperatoren sind dabei wie folgt definiert:

$$\hat{\sigma}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z) = \frac{1}{2} (\tilde{c}_{i\uparrow}^+ \tilde{c}_{i\downarrow} + \tilde{c}_{i\downarrow}^+ \tilde{c}_{i\uparrow}, -i(\tilde{c}_{i\uparrow}^+ \tilde{c}_{i\downarrow} - \tilde{c}_{i\downarrow}^+ \tilde{c}_{i\uparrow}), \tilde{n}_{i\uparrow} - \tilde{n}_{i\downarrow}). \quad (3.38)$$

Auf Grund der oben gemachten Annahmen zum korrelierten Hopping im tJ-Modell (nur über leere Gitterplätze, keine Doppelbesetzungen) gilt bei Halbfüllung ($n = 1$) die Operatoridentität

$$\tilde{n}_{i\uparrow} + \tilde{n}_{i\downarrow} = 1. \quad (3.39)$$

Damit folgt aus dem tJ-Hamiltonoperator bei Halbfüllung

$$H_{tJ}^{n=1} = \sum_{ij} \frac{2t_{ij}^2}{U} \left\{ \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j - \frac{1}{4} \right\} \quad (3.40)$$

der auf Anderson [5] zurückgehende Hamiltonoperator mit einer antiferromagnetischen Austauschwechselwirkung.

3.2.4 Spektrale Eigenschaften im Bereich starker Kopplung

In Kapitel 3.2.2 wurde die Spektraldichte des Hubbardmodells bei ausgeschaltetem Hopping abgeleitet. Sie besteht aus zwei Deltapeaks, die bei den Anregungsenergien (3.22) liegen und durch die Coulombabstoßung U energetisch voneinander separiert sind. Schaltet man das Hopping ein, so werden zumindest für großes U ($U \gg W$) immer noch zwei separierte Peaks in der Zustandsdichte erscheinen, die allerdings

3 Das Hubbardmodell

unter der Wirkung des Hoppings zu Bändern (unteres und oberes Hubbardband) endlicher Breite erweitert werden. Damit einhergehend ist mit einer Verschiebung des spektralen Gewichts und des Bandschwerpunktes im Vergleich zu den Werten des unendlich schmalen Bandes zu rechnen. Ein weiterer Effekt ist das Auftauchen von Satellitenpeaks bei den Energien:

$$E_p = t_0 - z_\sigma \frac{B}{2} + pU, \quad (3.41)$$

wobei p Werte $p \neq 0, 1$ aus den ganzen Zahlen annimmt. Diese Satellitenpeaks rühren von Mehrfachprozessen her, unter denen man zum Beispiel das Einbringen eines Elektrons ins System bei gleichzeitigem Hopping eines anderen Elektrons mit Änderung der Anzahl der doppelt besetzten Gitterplätze versteht.

Um diese Effekte genauer quantifizieren zu können, soll nun die Spektraldichte im Grenzfall großer U genauer untersucht werden. Die Spektralmomente, die im Anhang definiert sind (184), liefern nur Informationen über die (gesamte) Spektraldichte, sind aber bezogen auf individuelle Peaks von nur begrenzter Aussagekraft. Die großartige Idee, die in der Arbeit von Harris und Lange [46] genutzt wird, um Informationen über einzelne Peaks zu erhalten, besteht darin, die Erzeuger- und Vernichterooperatoren folgendermaßen zu zerlegen:

$$c_{i\sigma}^{(+)} = \sum_{p \in \mathbb{Z}} c_{i\sigma;p}^{(+)} \quad (3.42)$$

Die neuen Operatoren $c_{i\sigma;p}^{(+)}$ haben die Eigenschaft, dass ihre Matrixelemente nur für Zustände, die sich grob um die Energie pU unterscheiden, von null verschieden sind:

$$\langle b | c_{i\sigma;p}^{(+)} | a \rangle \neq 0 \quad (3.43)$$

nur für

$$E_b - E_a = pU + O(W). \quad (3.44)$$

Aus dieser Definition folgt unmittelbar

$$(c_{i\sigma;p})^+ = c_{i\sigma;-p}^+ \quad (3.45)$$

Mit Hilfe der neuen Operatoren lässt sich die Gesamtspektraldichte $S_{ij\sigma}(E)$ in Teilspektraldichten zerlegen:

$$S_{ij\sigma}(E) = \sum_p S_{ij\sigma;p}(E) = \sum_p \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{iE(t-t')} \left\langle [c_{i\sigma;-p}(t), c_{j\sigma;p}^+(t')] \right\rangle. \quad (3.46)$$

Anhand der Spektraldarstellung der (Teil-)Spektraldichte:

$$S_{ij\sigma;p}(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \sum_{n,m} \langle E_n | c_{j\sigma;p}^+ | E_m \rangle \langle E_m | c_{i\sigma;-p} | E_n \rangle \times \\ \times e^{-\beta E_n} (e^{\beta E} + 1) \delta(E - (E_n - E_m)) \quad (3.47)$$

erkennt man, dass diese tatsächlich nur in einem schmalen Bereich um $E = pU$ von null verschieden ist, d.h. einen einzelnen Peak repräsentiert. Wie findet man nun die Zerlegung (3.42) der Erzeuger-/Vernichtoperatoren? Das Problem bei der Konstruktion der $c_{i\sigma;p}$ stellen wieder die Hoppingprozesse, die die Anzahl der doppelt besetzten Gitterplätze ändern, dar. Schaltet man das Hopping aus, so findet man unmittelbar:

$$c_{i\sigma} \stackrel{W \rightarrow 0}{=} c_{i\sigma;0} + c_{i\sigma;-1} = (1 - n_{i-\sigma})c_{i\sigma} + n_{i-\sigma}c_{i\sigma}. \quad (3.48)$$

Im letzten Kapitel hatten wir den ursprünglichen Hubbardhamiltonoperator so auf neue Quasiteilchenoperatoren umgeschrieben, dass für diese die störenden Hoppingterme bis zur quadratischen Ordnung in $(1/U)$ eliminiert wurden. Für das dadurch erhaltene, effektive Modell (3.36) gilt dann (näherungsweise) die Zerlegung (3.48), wenn man die dort auftretenden Operatoren durch Operatoren mit Tilde ersetzt. Um nun die Spektralmomente der einzelnen Peaks berechnen zu können, müssen wir diese noch über (3.26) auf die ursprünglichen elektronischen Operatoren $c_{i\sigma}^{(+)}$ umrechnen:

$$\begin{aligned} c_{i\sigma} &= e^{i\tilde{S}} \tilde{c}_{i\sigma} e^{-i\tilde{S}} = \sum_{p=-1,0} \left(\tilde{c}_{i\sigma,p} + i[\tilde{S}, \tilde{c}_{i\sigma,p}] - \frac{1}{2}[\tilde{S}, [\tilde{S}, \tilde{c}_{i\sigma,p}]] + \dots \right) \\ &= \sum_{p=-1,0} \left(\tilde{c}_{i\sigma,p} + \frac{1}{U}[\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,p}] + \left(\frac{1}{U}\right)^2 \left\{ [[\tilde{T}_1 + \tilde{T}_{-1}, \tilde{T}_0], \tilde{c}_{i\sigma,p} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2}[\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_1 - \tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,p}]] \right\} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^3 \Big). \end{aligned}$$

Die bis zur Ordnung $(1/U)^2$ korrekte Spektralzerlegung der Operatoren (3.42) kann dann direkt abgelesen werden:

$$\begin{aligned} c_{i\sigma,2} &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{U}\right)^2 [\tilde{T}_1, [\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,0}]], \\ c_{i\sigma,1} &= \frac{1}{U}[\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,0}] + \left(\frac{1}{U}\right)^2 \left([[\tilde{T}_1, \tilde{T}_0], \tilde{c}_{i\sigma,0}] + \frac{1}{2}[\tilde{T}_1, [\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,-1}]] \right), \\ c_{i\sigma,0} &= \tilde{c}_{i\sigma,0} + \frac{1}{U}[\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,-1}] \\ &\quad + \left(\frac{1}{U}\right)^2 \left([[\tilde{T}_1, \tilde{T}_0], \tilde{c}_{i\sigma,-1}] - \frac{1}{2}[\tilde{T}_1, [\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,0}]] - \frac{1}{2}[\tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,0}]] \right) \\ c_{i\sigma,-1} &= \tilde{c}_{i\sigma,-1} - \frac{1}{U}[\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,0}] \\ &\quad + \left(\frac{1}{U}\right)^2 \left([[\tilde{T}_{-1}, \tilde{T}_0], \tilde{c}_{i\sigma,0}] - \frac{1}{2}[\tilde{T}_1, [\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,-1}]] - \frac{1}{2}[\tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,-1}]] \right), \\ c_{i\sigma,-2} &= -\frac{1}{U}[\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,-1}] + \left(\frac{1}{U}\right)^2 \left([[\tilde{T}_{-1}, \tilde{T}_0], \tilde{c}_{i\sigma,-1}] + \frac{1}{2}[\tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,0}]] \right), \\ c_{i\sigma,-3} &= \left(\frac{1}{U}\right)^2 \frac{1}{2}[\tilde{T}_{-1}, [\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,-1}]]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

3 Das Hubbardmodell

Die Spektralmomente der einzelnen Hubbardbänder im Grenzfall großer Coulombabstoßung, aus denen so wichtige Aussagen wie das spektrale Gewicht und der Bandschwerpunkt des Teilbandes folgt, können jetzt bestimmt werden:

$$M_{ij\sigma}^{p,m} = \left\langle \left\{ \underbrace{[\dots [c_{i\sigma,-p}, \tilde{\mathcal{H}}], \tilde{\mathcal{H}}], \dots, \tilde{\mathcal{H}}]}_{m\text{-fach}}, c_{j\sigma,p}^+ \right\} \right\rangle. \quad (3.50)$$

Man beachte, dass wir zur Berechnung der Momente den Kommutator mit dem transformierten Hamiltonoperator $\tilde{\mathcal{H}}$ (3.25) bilden müssen, da wir die Operatoren $c_{i\sigma,p}$ in (3.49) durch die neuen Quasiteilchenoperatoren $\tilde{c}_{i\sigma}^{(+)}$ ausgedrückt haben und deren Zeitabhängigkeit durch

$$\tilde{c}_{i\sigma}^{(+)}(t) = e^{i\tilde{\mathcal{H}}t} \tilde{c}_{i\sigma}^{(+)} e^{-i\tilde{\mathcal{H}}t} \quad (3.51)$$

bestimmt ist.

Wir wollen zunächst die spektralen Gewichte des unteren und oberen Hubbardbandes und der Satellitenpeaks diskutieren. Diese sind durch das entsprechende (lokale) nullte Spektralmoment gegeben. Die ersten Satellitenpeaks befinden sich bei $E = 2U$ und $E = -U$. Da $[\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,0}] = [\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,-1}] = 0$ gilt, folgt für deren spektrales Gewicht:

$$M_{ii\sigma}^{2,0} \sim M_{ii\sigma}^{-1,0} \sim \left(\frac{W}{U} \right)^4. \quad (3.52)$$

Die höheren Satellitenpeaks sind mindestens von derselben Ordnung. Dies bedeutet, dass in dem hier interessierenden Grenzfall starker Coulombabstoßung U die Satellitenpeaks praktisch keine Rolle spielen und vernachlässigt werden können.

Für die Hubbardbänder findet man dagegen unter Zuhilfenahme der im Anhang 8.1 zu findenden Antikommutatoren:

$$M_{ij\sigma}^{0,0} = \left\langle \{c_{i\sigma,0}, c_{j\sigma,0}^+\} \right\rangle = \left\langle \{\tilde{c}_{i\sigma,0}, \tilde{c}_{j\sigma,0}^+\} \right\rangle \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{1}{U} \left(\left\langle \{[\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,-1}], \tilde{c}_{j\sigma,0}^+\} \right\rangle + \left\langle \{\tilde{c}_{i\sigma,0}, [\tilde{c}_{j\sigma,1}^+, \tilde{T}_{-1}]\} \right\rangle \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2 \\ &= \delta_{ij}(1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle) + \frac{2}{U} (B_{ij-\sigma} - t_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{j-\sigma} \rangle)) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2, \end{aligned}$$

$$M_{ij\sigma}^{1,0} = \left\langle \{c_{i\sigma,-1}, c_{j\sigma,1}^+\} \right\rangle \quad (3.54)$$

$$= \delta_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle - \frac{2}{U} (B_{ij-\sigma} - t_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{j-\sigma} \rangle)) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2 = 1 - M_{ij\sigma}^{0,0}$$

mit

$$\begin{aligned} B_{ij\sigma} &= t_{ij} \left(\left\langle c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma}^+ c_{j\sigma} c_{j-\sigma} \right\rangle + \left\langle c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^+ c_{j\sigma} \right\rangle + \langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{j\sigma} \rangle \right) \\ &+ \delta_{ij} \sum_l t_{il} \left\langle c_{i\sigma}^+ c_{l\sigma} (n_{i-\sigma} + n_{l-\sigma} - 1) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Nehmen wir wieder an, dass Doppelbesetzungen für große U und ($n < 1$) selten sind, so finden wir für das spektrale Gewicht des unteren Hubbardbandes unter

Beachtung, dass die t_{ij} ihrer Definition nach nur für $i \neq j$ von null verschieden sind:

$$\begin{aligned}\alpha_\sigma^{(0)} &= M_{ii\sigma}^{0,0} = 1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle - \frac{2}{U} \sum_l t_{il} \langle c_{i-\sigma}^+ c_{l-\sigma} (n_{i\sigma} + n_{l\sigma} - 1) \rangle + O\left(\frac{1}{U}\right)^2 \\ &\approx 1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle - \frac{2}{U} \sum_l t_{il} \langle c_{i-\sigma}^+ c_{l-\sigma} \rangle.\end{aligned}\quad (3.56)$$

Die Korrektur zum Resultat des unendlich schmalen Bandes (3.23) ist zumindest für kleine $n < 1$ eine positive Größe⁶, das spektrale Gewicht des unteren Hubbardbandes wächst also unter der Wirkung von Hoppingprozessen an, während das Gewicht des oberen Bandes um denselben Betrag (in der Ordnung $(1/U)$) reduziert wird. Diese Verschiebung des spektralen Gewichts bringt zum Ausdruck, dass auf Grund der Coulombabstoßung der Prozess des korrelierten Weghüpfens eines Elektrons von einem Gitterplatz, auf den gerade ein anderes Elektron gebracht wurde, wahrscheinlicher ist als der umgekehrte Prozess des Zuhüpfens eines Elektrons beim Einbringen eines Elektrons. Damit erhöht sich die effektive Zahl der leeren Gitterplätze im System.

Wir kommen nun zur Änderung der Bandschwerpunkte unter Wirkung des Hüpfens der Elektronen. Diese lassen sich aus den ersten spektralen (Teil-)Momenten berechnen:

$$\begin{aligned}M_{ij\sigma}^{1,0} &= \langle [c_{i\sigma,0}, \tilde{\mathcal{H}}], c_{j\sigma,0}^+ \rangle = U \langle [\tilde{c}_{i\sigma,0}, \tilde{V}], \tilde{c}_{j\sigma,0}^+ \rangle + \langle [[\tilde{T}_1, \tilde{c}_{i\sigma,-1}], \tilde{V}], \tilde{c}_{j\sigma,0}^+ \rangle \\ &\quad + \langle [\tilde{c}_{i\sigma,0}, \tilde{V}], [\tilde{c}_{j\sigma,1}^+, \tilde{T}_{-1}] \rangle + \langle [\tilde{c}_{i\sigma,0}, \tilde{T} + \tilde{H}_B], \tilde{c}_{j\sigma,0}^+ \rangle + O\left(\frac{1}{U}\right) \\ &= \left(\delta_{ij} (t_0 - z_\sigma \frac{B}{2}) + t_{ij} \right) (1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle) + (B_{ij-\sigma} - t_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{j-\sigma} \rangle)) \\ &\quad + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right),\end{aligned}\quad (3.58)$$

$$\begin{aligned}M_{ij\sigma}^{1,1} &= \langle [c_{i\sigma,-1}, \tilde{\mathcal{H}}], c_{j\sigma,1}^+ \rangle = U \langle [\tilde{c}_{i\sigma,-1}, \tilde{V}], \tilde{c}_{j\sigma,1}^+ \rangle + \langle [\tilde{c}_{i\sigma,-1}, \tilde{T} + \tilde{H}_B], \tilde{c}_{j\sigma,1}^+ \rangle \\ &\quad - \langle [[\tilde{T}_{-1}, \tilde{c}_{i\sigma,0}], \tilde{V}], \tilde{c}_{j\sigma,1}^+ \rangle - \langle [\tilde{c}_{i\sigma,-1}, \tilde{V}], [\tilde{c}_{j\sigma,0}^+, \tilde{T}_1] \rangle \\ &= \left(\delta_{ij} (U + t_0 - z_\sigma \frac{B}{2}) + t_{ij} \right) \langle n_{i-\sigma} \rangle + (B_{ij-\sigma} - t_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{j-\sigma} \rangle)) \\ &\quad + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right).\end{aligned}\quad (3.59)$$

⁶Dies sieht man zum Beispiel für das einfach-kubische Gitter mit Nächste-Nachbar-Hopping $t_{ij} = t$ folgendermaßen: Unter der Annahme von Isotropie der Nachbarplätze eines Gitterplatzes \mathbf{R}_i gilt für den nichtlokalen Erwartungswert:

$$\langle c_{i\sigma}^+ c_{(i+\Delta)\sigma} \rangle = \frac{1}{6} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\Delta} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_\Delta} \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \frac{1}{12N} \sum_{\mathbf{k}} (\cos \Delta k_x + \cos \Delta k_y + \cos \Delta k_z) \langle n_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (3.57)$$

Wählt man die $t_{ij} = t$ negativ, so liegen die energetisch tiefsten Zustände der Elektronen um den Gamma-Punkt $\mathbf{k} \sim 0$. Damit wird die Korrelationsfunktion (3.57) zumindest für kleine Elektronendichten $n < 1$ positiv.

3 Das Hubbardmodell

Damit ergibt sich für den Bandschwerpunkt des unteren und oberen Hubbardbandes:

$$E_{\sigma}^{(0)} = \frac{M_{ii\sigma}^{1,0}}{M_{ii\sigma}^{0,0}} = t_0 - z_{\sigma} \frac{B}{2} + \frac{1}{1 - \langle n_{i-\sigma} \rangle} B_{ii-\sigma} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right), \quad (3.60)$$

$$E_{\sigma}^{(1)} = \frac{M_{ii\sigma}^{1,1}}{M_{ii\sigma}^{0,1}} = U + t_0 - z_{\sigma} \frac{B}{2} + \frac{1}{\langle n_{i-\sigma} \rangle} B_{ii-\sigma} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right). \quad (3.61)$$

Anders als beim spektralen Gewicht gibt es beim Bandschwerpunkt eine selbst für große U nicht zu vernachlässigende Energiekorrektur $\Delta E \sim B_{ii-\sigma}$ im Vergleich zu den Werten des unendlich schmalen Bandes (3.22). Wie schon in der Originalarbeit von Harris und Lange gezeigt wurde, ist gerade diese spinabhängige Bandverschiebung entscheidend für eine stabile ferromagnetische Phase und muss in einer Theorie, die die Möglichkeit von Ferromagnetismus im Hubbardmodell untersucht, berücksichtigt werden.

Bisher haben wir nur die Bandschwerpunkte der Hubbardbänder betrachtet. Die wellenzahlabhängigen Bandenergien erhalten wir durch Fouriertransformation der Spektralmomente der Teilbänder:

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = 1 - \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{2}{U} (B_{\mathbf{k}-\sigma} - (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2, \quad (3.62)$$

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = \langle n_{-\sigma} \rangle - \frac{2}{U} (B_{\mathbf{k}-\sigma} - (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right)^2, \quad (3.63)$$

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = t_0 - z_{\sigma} \frac{B}{2} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0)(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) + \frac{1}{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle} B_{\mathbf{k}-\sigma} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right), \quad (3.64)$$

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = U + t_0 - z_{\sigma} \frac{B}{2} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{1}{\langle n_{-\sigma} \rangle} B_{\mathbf{k}-\sigma} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{U}\right). \quad (3.65)$$

3.2.5 Das unendlichdimensionale Gitter

Die freie Zustandsdichte der linearen Kette mit der Tight-Binding-Dispersionsbeziehung

$$\epsilon_{k_x} = -2t \cos k_x \quad (3.66)$$

ist bekanntlich [27] durch

$$\rho_{d=1}(x) = \frac{1}{N} \sum_{k_x} \delta(x + 2t \cos k_x) = \frac{1}{\pi} \frac{\Theta(2t - |x|)}{\sqrt{4t^2 - x^2}} \quad (3.67)$$

gegeben. Die Zustandsdichte höher d -dimensionaler Gitter vom einfach-kubischen Typ lässt sich dann als Faltungsintegral von eindimensionalen Zustandsdichten schreiben:

$$\begin{aligned} \rho_d(x) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x + 2t(\cos k_{x_1} + \dots + \cos k_{x_d})) \\ &= \int dx_1 \dots dx_{d-1} \delta(x - x_1 - \dots - x_d) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x_1 + 2t \cos k_{x_1}) \dots \delta(x_d + 2t \cos k_{x_1}) \\ &= \int dx_1 \dots dx_{d-1} \rho_1(x - x_1 - \dots - x_{d-1}) \rho_1(x_1) \dots \rho_1(x_{d-1}), \end{aligned} \quad (3.68)$$

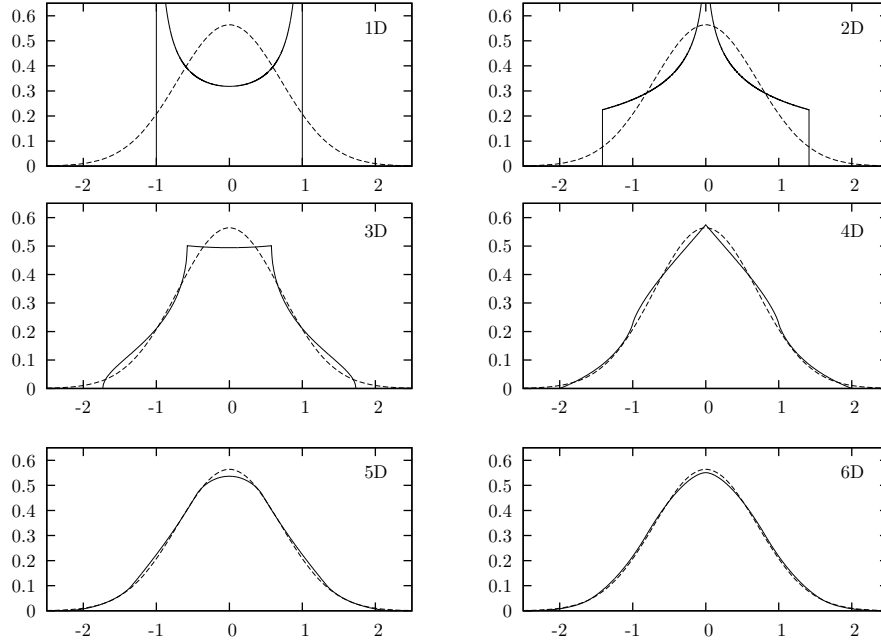


Abbildung 3.1: Freie Zustandsdichten für Gitter vom einfach-kubischen Typ verschiedener Dimensionalität (durchgezogene Linien). Die gestrichelte Kurve zeigt die Zustandsdichte des unendlichdimensionalen Gitters. Parameter: $t^* = \sqrt{2}$ eV.

wobei die Breite der d -dimensionalen Zustandsdichte $W_d = 4dt$ beträgt. Um im Grenzfall hoher Dimensionalität eine vernünftige⁷ Zustandsdichte zu erhalten, muss der Hoppingparameter entsprechend der Dimension skaliert werden. Die richtige Skalierung ergibt sich aus der Forderung, dass die Varianz (2.Moment) der Zustandsdichte konstant sei:

$$m_d^{(2)} = \int dx x^2 \rho_d(x) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}})^2 = 2dt^2 \stackrel{!}{=} \text{const.} \quad (3.69)$$

Man findet somit für die Skalierung des Hoppings:

$$t \rightarrow \frac{t^*}{\sqrt{2d}}. \quad (3.70)$$

Nur diese Skalierung liefert im Limes $d \rightarrow \infty$ eine nichttriviale Zustandsdichte [162, 89]. Um dies noch einsichtiger zu machen, wollen wir nun die Zustandsdichte in $1/d$ entwickeln. Dazu bemerken wir zunächst, dass nach dem Faltungstheorem der Fouriertransformation

$$\rho_d(x) = (2\pi)^{\frac{d-1}{2}} \mathcal{F}^{-1} \left\{ (\mathcal{F}\{\rho_1(x)\})^d \right\} \quad (3.71)$$

⁷Würde man z.B. t konstant wählen, würde die Zustandsdichte im Limes $N \rightarrow \infty$ identisch verschwinden.

3 Das Hubbardmodell

gilt, wobei die Fouriertransformation definiert ist als

$$\mathcal{F}\{f(x)\}(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-ihx} f(x). \quad (3.72)$$

Die Fouriertransformierte der eindimensionalen Zustandsdichte (3.67) ist die Besselfunktion nullter Ordnung:

$$\mathcal{F}\{\rho_1(x)\}(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} J_0(2th). \quad (3.73)$$

Setzen wir dies in (3.71) ein und entwickeln das Fourierintegral der Rücktransformation nach Potenzen von $1/d$, so erhalten wir mit der Skalierung (3.70):

$$\begin{aligned} \rho_d(x) = \frac{1}{t^* \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{x}{t^*}\right)^2} & \left\{ 1 - \frac{1}{16d} \left(\left(\frac{x}{t^*}\right)^4 - 6 \left(\frac{x}{t^*}\right)^2 + 3 \right) \right. \\ & \left. + \frac{1}{4608d^2} \left(9 \left(\frac{x}{t^*}\right)^8 - 188 \left(\frac{x}{t^*}\right)^6 + 930 \left(\frac{x}{t^*}\right)^4 - 900 \left(\frac{x}{t^*}\right)^2 - 15 \right) + O\left(\frac{1}{d}\right)^3 \right\}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Jede andere Skalierung des Hoppings würde die Gaußverteilung im $d = \infty$ Limes entweder zu einer Deltadistribution zusammenschnüren oder unendlich breit werden lassen.

Welche Auswirkungen hat nun der Grenzübergang zu einem unendlichdimensionalen Gitter auf die Physik des Hubbardmodells? Um diese Frage zu beantworten, bemerken wir zunächst, dass das Problem als gelöst betrachtet werden kann, wenn man die Selbstenergie, die die Ein-Teilchen-Greenfunktion bestimmt, kennt. Die entscheidende Vereinfachung im unendlichdimensionalen Hubbardmodell, die erstmals von Metzner und Vollhardt [89] erkannt wurde, besteht darin, dass in diesem Limes die Selbstenergie eine lokale, wellenzahlunabhängige Größe wird. Das Problem des Hubbardmodells bleibt aber auch dann nichttrivial, da die Selbstenergie weiterhin eine dynamische (energieabhängige) Funktion ist, die sich für den allgemeinen Fall nicht exakt berechnen läßt. Wir wollen den Beweis dieses Ergebnisses hier wegen seiner Wichtigkeit rekapitulieren und folgen dabei der Argumentation von Müller-Hartmann [93]. Die diagrammatische Entwicklung der Selbstenergie [101, 13] bis zur quadratischen Ordnung in U für das Hubbardmodell ist in Abbildung 3.2 dargestellt. Es müssen wegen der speziellen Struktur der Wechselwirkung beim Hubbardmodell nur wenige Diagramme beachtet werden. Insbesondere verschwinden alle Diagramme, die Austauschprozesse beschreiben⁸. Die Wellenzahlabhängigkeit der Selbstenergie stammt von den Diagrammen mit zwei äußeren Vertizes. Ein solcher äußerer Vertex ist in Abbildung 3.3 gezeigt. Nach den Regeln der Diagrammanalyse

⁸Bei diesen wird der obere und untere Vertexpunkt einer Wechselwirkungslinie durch einen freien Propagator verbunden. Diese verschwinden beim Hubbardmodell, da Elektronen am unteren und oberen Vertexpunkt entgegengesetzten Spin haben müssen. Da der freie Propagator von sich aus keine Spinabhängigkeit aufweist, muss diese immer dazugedacht werden (der freie Propagator garantiert Spinerhaltung).

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} + \mathcal{O}(U^3)$$

Abbildung 3.2: Diagrammatische Entwicklung der Selbstenergie des Hubbardmodells bis zur zweiten Ordnung in U .

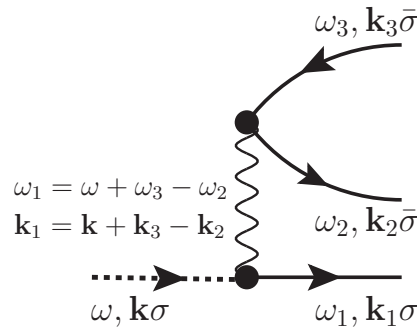


Abbildung 3.3: Äußerer Vertex eines Selbstenergie-Diagramms mit angedeutetem einlaufenden Propagator (gestrichelte Linie).

3 Das Hubbardmodell

liefert dieser ein Beitrag der Form:

$$\sim \frac{1}{N^3} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3} G_{\mathbf{k}_1}^{(0)}(\omega_1) G_{\mathbf{k}_2}^{(0)}(\omega_2) G_{\mathbf{k}_3}^{(0)}(\omega_3) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3). \quad (3.75)$$

Die äußere Wellenzahl \mathbf{k} geht dabei über die Impulserhaltung explizit in den Beitrag des jeweiligen Diagramms mit ein. Schreiben wir die Deltafunktion, die die Impulserhaltung garantiert, als

$$\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{R}(\mathbf{k} - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3)}, \quad (3.76)$$

so können wir mit Hilfe der Definition der Gitterzustandsdichten (221) den Vertex-Beitrag umschreiben zu:

$$\sim \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{R}\mathbf{k}} \prod_{l=1}^3 \int d\epsilon_l G_{\epsilon_l}^{(0)}(\omega_l) \rho_d^{\mathbf{R}}(\epsilon_l). \quad (3.77)$$

Im Anhangskapitel zu den Gitterzustandsdichten 8.3 wird gezeigt, dass diese im Grenzfall $d \rightarrow \infty$ wie

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \rho_d^{\mathbf{R}} \sim \mathcal{O}\left(\frac{1}{d}\right)^{\frac{1}{2} \sum_{l=1}^d |n_l|} \quad (3.78)$$

verschwinden, wobei $\mathbf{R} = \sum_l n_l \mathbf{e}_l$ gilt. Es trägt nur der $\mathbf{R} = \mathbf{0}$ Term der Summe in (3.77) zum Diagramm bei

$$\sim \prod_{l=1}^3 \int d\epsilon_l G_{\epsilon_l}^{(0)}(\omega_l) \rho_{d=\infty}(\epsilon_l). \quad (3.79)$$

Somit wird die Selbstenergie im Limes unendlicher Gitterdimension wellenzahlunabhängig.

Die Lösung des Hubbardmodells stellt auch im Limes unendlicher Gitterdimension ein nichttriviales Problem dar. Hilfreich ist hierbei die Erkenntnis, dass sich das Hubbardmodell in diesem Grenzfall auf ein Impurity-Problem abbilden lässt⁹ [38, 103]. Diese Abbildung ist unter dem Namen *Dynamische Molekularfeldtheorie (DMFT)* bekannt. Zur effektiven Lösung des verbleibenden Impurity-Problems stehen eine Vielzahl analytischer und numerischer Verfahren zu Verfügung, es ist aber auch weiterhin ein Gegenstand aktueller Forschung [158, 159, 155].

⁹In der Literatur wird meist das Single-Impurity-Andersonmodell verwendet, es kann aber z.B. auch das Wolffmodell [161, 38] benutzt werden.

3.3 Näherungsverfahren

3.3.1 Der Spektraldichteansatz

Die Ergebnisse, die wir für den Grenzfall des unendlich schmalen Bandes und die Hubbardbänder bei großer Coulombabstoßung U erhalten haben, legen nahe, die Spektraldichte des Hubbardmodells als Zweipol-Ansatz zu schreiben:

$$S_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} \delta(E + \mu - E_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)}) + \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} \delta(E + \mu - E_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}). \quad (3.80)$$

Um die spektralen Gewichte $\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(i)}$ und die Anregungsenergien $E_{\mathbf{k}\sigma}^{(i)}$ festzulegen, bietet es sich an, die Momente der Spektraldichte (184) zu verwenden. Diese lassen sich zumindest in niedriger Ordnung leicht mit Hilfe der Beziehung (185) berechnen und die ersten vier Momente für das Hubbardmodell sind im Anhang 8.2 zu finden. Aus (3.80) und (184) ergibt sich mit diesen ein Gleichungssystem, dessen Lösung die folgenden Anregungsenergien und zugehörigen Gewichte liefert:

$$E_{\mathbf{k}\sigma}^{(0/1)} = \frac{1}{2} \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + t_0 - z_{\sigma} B + \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} + U \right) \quad (3.81)$$

$$\mp \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} + t_0 - \epsilon_{\mathbf{k}} - U(2 \langle n_{-\sigma} \rangle - 1) \right)^2 + 4U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)},$$

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{(0/1)} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \left(1 + \frac{4U^2 (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \langle n_{-\sigma} \rangle}{\left(\frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} + t_0 - \epsilon_{\mathbf{k}} - U(2 \langle n_{-\sigma} \rangle - 1) \right)^2} \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (3.82)$$

Die Größe $B_{\mathbf{k}\sigma}$ ist die Fouriertransformierte der in (3.55) definierten $B_{ij\sigma}$.

Die Selbstenergie der zugehörigen Greenfunktion kann mit Hilfe der Spektraldarstellung (152) berechnet werden und ergibt sich zu:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle \frac{E + \mu - t_0 + z_{\sigma} \frac{B}{2} - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}}{E + \mu - t_0 + z_{\sigma} \frac{B}{2} - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}}. \quad (3.83)$$

Eine solche Form der Selbstenergie wurde erstmalig von L. M. Roth [117] abgeleitet. Sie ist in der Literatur auch unter der Abkürzung „SDA“¹⁰ bekannt und wurde in einer Reihe von Arbeiten insbesondere zur Untersuchung magnetischer Ordnung herangezogen [102, 54, 6, 122].

Entwickelt man die Anregungsenergien (3.81) und spektralen Gewichte (3.82) für große U , so erhält man die im Rahmen der exakten Entwicklung nach Harris und Lange gefundenen Ergebnisse (3.62 - 3.65). Damit haben wir ein wichtiges Kriterium für die Beurteilung einer approximativen Theorie erhalten. Es genügt demnach bei Vorhandensein von zwei Anregungsenergien (Hubbardbändern), dass die ersten vier spektralen Momente¹¹ korrekt von der Theorie reproduziert werden, um konsistent mit der $(1/U)$ Entwicklung nach Harris und Lange bis zur berechneten Ordnung zu sein. Insbesondere die spinabhängige Bandverschiebung $B_{\mathbf{k}\sigma}$ ist korrekt enthalten.

¹⁰SDA steht für spectral density ansatz.

¹¹Hier ist von den „globalen“ Momenten der Gesamtspektraldichte die Rede, nicht von den Teilmomenten der einzelnen Anregungspeaks, wie sie in Kapitel 3.2.4 abgeleitet wurden.

3 Das Hubbardmodell

Die Größe $B_{\mathbf{k}\sigma}$ setzt sich aus zwei Beiträgen zusammen:

$$B_{\mathbf{k}\sigma} = B_{S,\sigma} + B_{W,\mathbf{k}\sigma}. \quad (3.84)$$

Der erste Teil, die spinabhängige Bandverschiebung $B_{S,\sigma}$, kann exakt bestimmt werden:

$$\begin{aligned} B_{S,\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} \langle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} (2n_{i-\sigma} - 1) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \left(\frac{2}{U} (E - \epsilon_{\mathbf{k}} + z_{\sigma} \frac{B}{2}) - 1 \right) S_{\mathbf{k}\sigma}(E - \mu). \end{aligned} \quad (3.85)$$

Diese etwas überraschende Tatsache¹² wird im Anhangskapitel 8.4 zur Rothmethode noch einmal detailliert abgeleitet. Selbstverständlich muss diese Bestimmung selbstkonsistent erfolgen, da die Spektraldichte $S_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ über die Selbstenergie von $B_{S,\sigma}$ selbst abhängig ist.

Die Bandbreitenkorrektur:

$$\begin{aligned} B_{W,\mathbf{k}\sigma} &= \frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \\ &\quad \left(\langle c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma}^+ c_{j\sigma} c_{j-\sigma} \rangle + \langle c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle + \langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{j\sigma} \rangle \right) \end{aligned} \quad (3.86)$$

verhindert eine geschlossene Auswertung der SDA-Theorie, da die auftauchenden Korrelationsfunktionen, die entsprechend der von ihnen beschriebenen Prozesse als:

$$\langle c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma}^+ c_{j\sigma} c_{j-\sigma} \rangle : \text{Doppelsprung - Korrelation}, \quad (3.87)$$

$$\langle c_{i\sigma}^+ c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle : \text{Spinflip - Korrelation}, \quad (3.88)$$

$$\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle - \langle n_{i\sigma} \rangle \langle n_{j\sigma} \rangle : \text{Dichte - Korrelation} \quad (3.89)$$

bezeichnet werden, nicht durch schon bekannte Größen ausgedrückt werden können. Eine einfache Lösung besteht in der vollständigen Vernachlässigung dieses Terms. Das erscheint insofern gerechtfertigt, als die Bandbreitenkorrektur lediglich die Form des Bandes modifiziert, den wesentlicheren Bandschwerpunkt aber wegen

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} B_{W,\mathbf{k}\sigma} = 0 \quad (3.90)$$

unverändert läßt. Um den Einfluss der Bandbreitenkorrektur in erster Näherung abschätzen zu können, bietet sich eine andere Vorgehensweise an. Man berechnet die Korrelationsfunktionen nicht im vollen, sondern im freien System. Nach dem Wick'schen Theorem [101, 34] zerfallen die höheren Korrelationsfunktionen dann in solche niedrigerer Ordnung, die man wieder aus schon bekannten Größen berechnen

¹²Eine Vierpunktkorrelationsfunktion wird durch die Ein-Elektronen-Spektraldichte berechnet - normalerweise benötigt man zu deren Berechnung höhere Greenfunktionen (mit vier Operatoren).

kann. Damit ergibt sich:

$$B_{W,\mathbf{k}\sigma} \approx -\frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \left(\langle c_{i-\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} \rangle + \langle c_{j-\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} \rangle + \langle c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle \right)$$

$$= -(\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \left(2 \langle n_{\Delta\sigma} \rangle \langle n_{\Delta-\sigma} \rangle + \langle n_{\Delta\sigma} \rangle^2 \right) \quad (3.91)$$

$$= (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) B_{W\sigma}^{(\text{MF})}, \quad (3.92)$$

wobei im vorletzten Schritt $t_{ij} \neq 0$ nur für nächste Nachbarn und Isotropie im Gitter angenommen wurde. Dies ist sicherlich eine sehr grobe Näherung – so liefert z.B. die Doppelsprung-Korrelationsfunktion denselben Beitrag wie die Spinflip-Korrelationsfunktion. Für große U sollten jedoch zumindest für eine Bandbesetzung $n < 1$ Doppelsprünge sehr unwahrscheinlich werden, da Doppelbesetzungen dann mit einer hohen Energiestrafe belegt sind, während dies für Spinflip-Prozesse ersichtlich nicht zu gelten braucht.

Zu physikalisch wesentlich besser interpretierbaren Resultaten gelangt man, wenn man zur Berechnung der Korrelationsfunktionen in (3.86) die Rothmethode [117] oder den äquivalenten Zwei-Pol-Ansatz von Herrmann und Nolting [56, 54] verwendet.

Die vollständige Ableitung der SDA und der höheren Korrelationsfunktionen nach der Rothmethode findet sich im Anhangskapitel 8.4. In Abbildung 3.4 sind die resultierenden Korrelationsfunktionen für zwei verschiedenen Werte von U (schwarz: $U = 1$, rot: $U = 5$ eV) als Funktion der Bandbesetzung gezeigt. Die Doppelsprung-Korrelationsfunktion ist nun im Vergleich zur Spinflip-Korrelationsfunktion deutlich unterdrückt und geht mit steigendem U gegen null. Ein sehr interessantes Verhalten zeigen die Spinflip- und die Dichte-Korrelationsfunktion für $n \rightarrow 1$. Nähert man sich $n = 1$, fallen sie zunächst monoton ab, um dann kurz vor $n = 1$ abrupt anzusteigen. Dies zeigt die besondere Stellung, die dem halbgefüllten Band im Hubbardmodell zukommt. Eine genauere Diskussion dieses Punktes findet sich in [56]. Zum Vergleich werden in der Abbildung zusätzlich die Bandbreitenkorrektur nach der Rothmethode (durchgezogene Linie) und in der einfachen Entkopplung (3.91) (Strich-Punkt-Linie) gezeigt. Wie zu erwarten, stimmen Beide für kleine Bandbesetzungen recht gut überein, bei höheren Bandbesetzungen ($n > 0.5$) zeigen sich jedoch deutliche Abweichungen und (3.91) stellt in diesem Bereich keine gute Näherung mehr dar.

3.3.2 Störungstheorie zweiter Ordnung

Die im letzten Kapitel abgeleitete SDA-Selbstenergie ist, bedingt durch den zugrunde liegenden Zweipol-Ansatz, eine Theorie für den Bereich starker Coulombwechselwirkung U . Sie enthält außerdem keine Lebensdauereffekte (die SDA-Selbstenergie ist reell), die auf Grund von Elektron-Elektron-Streuung vorhanden sein sollten, wie bereits in der Arbeit von Kanamori [71] gezeigt wurde.

Im Bereich schwacher Kopplung ($U \ll W$) empfiehlt sich ein anderer Zugang – eine störungstheoretische Entwicklung der Selbstenergie in der Wechselwirkungsstärke U . Die Diagramme dieser Entwicklung für das Hubbardmodell bis einschließlich U^2 sind in Abbildung 3.2 dargestellt. Wird nur das Blasendiagramm erster Ordnung

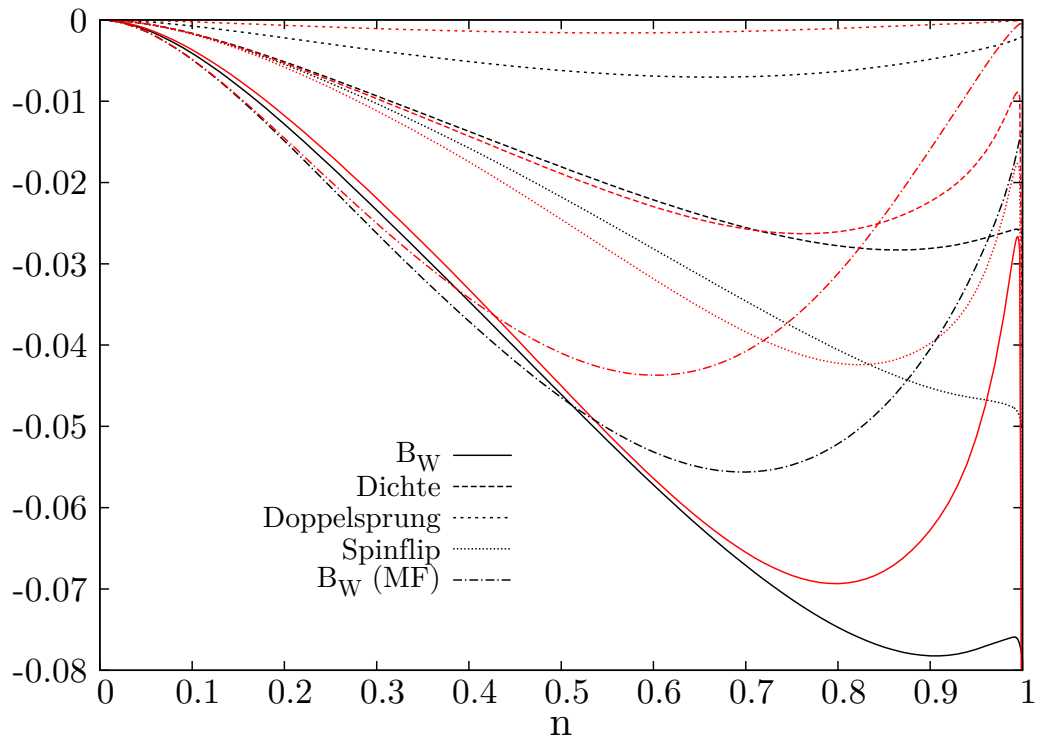


Abbildung 3.4: Die höheren Korrelationsfunktionen der Bandbreitenkorrektur nach der Roth-Methode als Funktion der Bandfüllung n berechnet für das einfach-kubische Gitter mit Tight-Binding-Dispersion und SDA-Selbstenergie. Parameter: $U = 1$ eV (schwarze Linien), $U = 5$ eV (rote Linien), $W = 1$ eV und $T = 10$ K.

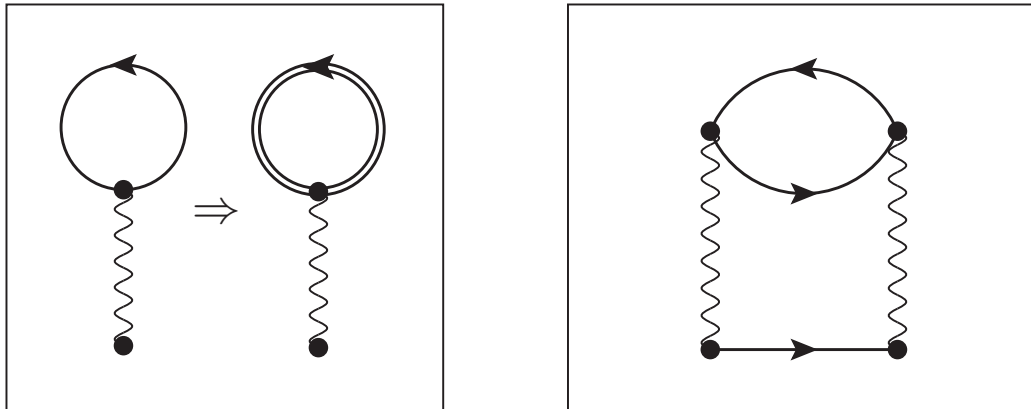


Abbildung 3.5: Linke Abbildung: Renormierung des Hartree-Diagramms der Selbstenergie. Dies entspricht der Summation einer unendlichen Teilreihe von Diagrammbeiträgen. In zweiter Ordnung ist dann nur noch das in der rechten Abbildung dargestellte Diagramm auszuwerten, um eine Selbstenergie zu erhalten, die alle Terme bis einschließlich $\mathcal{O}(U^2)$ enthält.

mitgenommen und renormiert man dieses¹³ wie in Abbildung 3.5 gezeigt, so erhält man die bekannte Hartree-Fock- oder Molekularfeld-Näherung:

$$\Sigma_{\sigma}^{\text{HF}} = -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle. \quad (3.93)$$

Durch die Renormierung des Diagramms erster Ordnung haben wir bereits eine unendliche Zahl von Diagrammen beliebiger Ordnung aufsummiert. So ist z.B. auch das erste Diagramm zweiter Ordnung aus Abbildung 3.2 bereits enthalten und wir müssen nur noch das zweite Diagramm auswerten, um eine Selbstenergie, die alle Diagramme bis zur zweiten Ordnung enthält, abzuleiten. Nach den Regeln der Diagrammanalyse ergibt sich für das verbleibende Diagramm:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E) = \frac{U^2}{N^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz S_{\mathbf{q}\sigma}(x) S_{\mathbf{p}-\sigma}(y) S_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}-\sigma}(z) \frac{F(x, y, z)}{E - x - y + z} \quad (3.94)$$

mit

$$F(x, y, z) = f_{-}(-x)f_{-}(-y)f_{-}(z) + f_{-}(x)f_{-}(y)f_{-}(-z) \quad (3.95)$$

und

$$f_{-}(x) = \frac{1}{\exp(\beta x) + 1}. \quad (3.96)$$

Die Gesamtselbstenergie bis zur zweiten Ordnung Störungstheorie (SOPT) hat dann die Gestalt

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{SOPT}}(E) = -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E). \quad (3.97)$$

Die Selbstenergie ist nun explizit von der Wellenzahl \mathbf{k} abhängig. Auf Grund des Energienenners hat die retardierte Selbstenergie ($E \rightarrow E_R + i0^+$) einen endlichen Imaginärteil auf einem beschränkten Energieintervall¹⁴ auf der reellen Achse, auf Grund dessen nun Lebensdauer-effekte auftreten werden. Alternativ zur diagrammatischen Störungstheorie kann dasselbe Resultat auch im Rahmen des Moriformalismus abgeleitet werden [14].

Der soeben abgeleiteten Selbstenergie haftet noch eine gewisse Willkür bezüglich der zu ihrer Berechnung zu wählenden Spektraldichten an. Um möglichst viele Diagrammbeiträge mitzunehmen, könnte man versucht sein, die volle Spektraldichte (selbstkonsistent) zu verwenden. Die resultierende paramagnetische Quasiteilchenzustandsdichte (QDOS) ist in Abbildung 3.6 (grüne Linie) für das einfach-kubische Gitter $n = 1$ (Halbfüllung), $T = 10.0$ K und $U = W = 1.0$ eV gezeigt. Die Selbstenergie wurde in lokaler Näherung berechnet (LSOPT)¹⁵, was später noch näher

¹³Unter Renormierung versteht man die Ersetzung des freien durch einen vollen Propagator. Dabei muss man darauf achten, nur die sogenannten Skelettdiagramme zu renormieren, um eine Doppelzählung von Diagrammen zu vermeiden. Details zur Diagrammtechnik finden sich z.B. in [2, 103, 13].

¹⁴Das Intervall ist bestimmt durch den Bereich, in dem die Spektraldichten zu den Argumenten x, y, z von null verschieden sind.

¹⁵Die lokale Näherung ist äquivalent mit einer Wellenzahlmittlung der Selbstenergie:

$$\Sigma_{\sigma}^{(\text{LSOPT})}(E) = -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E). \quad (3.98)$$

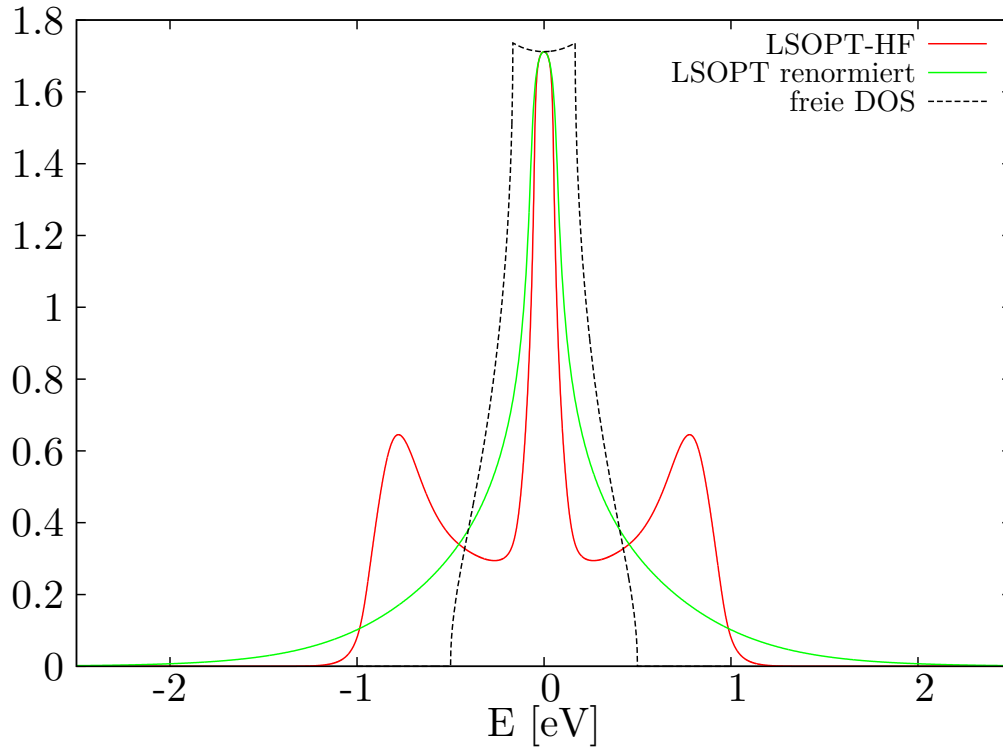


Abbildung 3.6: Quasiteilchenzustandsdichte der voll renormierten (lokalen) SOPT (grüne Kurve) und der SOPT um Hartree-Fock (rote Kurve). Die freie Zustandsdichte des kubischen Gitters ist ebenfalls gezeigt (gestrichelte, schwarze Kurve). Parameter: $W = 1$ eV, $U = 1$ eV, $n = 1$ und $T = 10$ K.

erläutert wird. Die QDOS besteht aus einem zentralen Peak bei der Fermienergie und monoton abfallenden Ausläufern. Rechnungen zu anderen Bandfüllungen und Wechselwirkungsstärken finden sich in [94]. Es fehlen die Strukturen, die man nach der Analyse des Limes starker Wechselwirkung erwarten würde. So existiert insbesondere keine Aufspaltung in ein unteres und oberes Hubbardband. Die voll renormierte Theorie scheint demnach, wenn überhaupt, nur für sehr kleine Wechselwirkungsstärken U gute Ergebnisse zu liefern.

Deutlich bessere Ergebnisse ergibt (bei Halbfüllung) eine Entwicklung um Hartree-Fock (SOPT-HF), d.h. die Verwendung der Spektraldichte

$$S_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{HF})}(E) = \delta(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - U \langle n_{-\sigma} \rangle). \quad (3.99)$$

Die resultierende QDOS der lokalen Näherung (LSOPT-HF) ist ebenfalls in Abbildung 3.6 (rote Linie) gezeigt. Es ist nun eine deutlich ausgeprägte Drei-Peak-Struktur zu erkennen. Neben dem unteren und oberen Hubbardband existiert ein zentraler (Kondo-)Peak bei der Fermienergie. Eine solche Form der paramagnetischen QDOS wird durch nichtstörungstheoretische Zugänge wie die DMFT prinzipiell bestätigt, allerdings zeigt die SOPT-HF keinen Metall-Isolator Übergang oberhalb eines kritischen $U_c \sim W$, wie er in der DMFT auftritt¹⁶. Eine einfache Rechnung zeigt, dass die SOPT-HF bei $n = 1$ die ersten drei Spektralmomente des Hubbardmodells korrekt reproduziert¹⁷ [113, 114]. Die Ursache für die Güte der SOPT-HF (in Bezug auf die Spektralmomente) bei Halbfüllung liegt in der zufällig wirkenden Tatsache begründet, dass das chemische Potential in diesem Fall den Wert $\mu = U \langle n_{-\sigma} \rangle$ annimmt. Damit ergibt sich aus der HF-Spektraldichte (3.99)

$$\langle n_{\sigma} \rangle^{(\text{HF})} = \langle n_{\sigma} \rangle = \frac{1}{2}. \quad (3.100)$$

Für andere Bandfüllungen ist eine Übereinstimmung von voller und HF-Bandbesetzung (bei gleichem chemischen Potential) nicht mehr gegeben und die SOPT-HF erfüllt nur noch das nullte und erste Spektralmoment korrekt. Hierin liegt nun eine einfache Möglichkeit begründet, die SOPT-HF im Hinblick auf die Spektralmomente zu verbessern. Statt der HF-Spektraldichte wählt man für (3.94) die Spektraldichte:

$$S_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)}(E) = \delta(E + \mu_{\sigma}^{(0)} - \epsilon_{\mathbf{k}}), \quad (3.101)$$

wobei $\mu_{\sigma}^{(0)}$ so gewählt wird, dass

$$\langle n_{\sigma} \rangle^{(0)} = \langle n_{\sigma} \rangle \quad (3.102)$$

gilt. Diese Wahl reproduziert für $n = 1$ die SOPT-HF und erfüllt zusätzlich die ersten drei Spektralmomente des Hubbardmodells für beliebige Bandfüllungen n . Sie sorgt für eine stetige Variation der Zustandsdichte in Abhängigkeit von der Bandbesetzung. Potthoff et al. [113, 156] diskutieren im Rahmen einer modifizierten Störungstheorie (MPT) zur Lösung des Anderson-Impurity-Problems, die wir im

¹⁶Dieser Punkt wird später noch diskutiert werden.

¹⁷Im Grenzfall unendlicher Gitterdimension werden auf Grund der Vereinfachungen, die sich für die Vierpunkt-Korrelationsfunktionen ergeben (siehe [26]), sogar die ersten vier Spektralmomente erfüllt.

nächsten Kapitel für den vollen Gitter-Hamiltonoperator des Hubbardmodells ableiten werden, verschiedene Möglichkeiten zur Bestimmung des chemischen Potentials in (3.101) und favorisieren ebenfalls die Bedingung (3.102).

Bisher haben wir nur die lokale (\mathbf{k} -gemittelte) Selbstenergie ausgewertet. Es erscheint zunächst hoffnungslos die volle, wellenzahlabhängige Selbstenergie (3.94) zu berechnen, da z.B. im dreidimensionalen Gitter für jeden \mathbf{k} -Wert ein sechsdimensionales Integral auf der ersten Brillouinzone des reziproken Raumes gelöst werden muss. Schweitzer und Czycholl haben in [132] die entscheidende Idee zur Umgehung dieser Schwierigkeit geliefert. Dazu wird die Selbstenergie durch Fouriertransformation als Funktion der Ortsraum-(Gitter-)Spektraldichten geschrieben:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E) = U^2 \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz S_{\mathbf{R}\sigma}^{(0)}(x) S_{\mathbf{R}-\sigma}^{(0)}(y) S_{-\mathbf{R}-\sigma}^{(0)}(z) \frac{F(x, y, z)}{E - x - y + z}. \quad (3.103)$$

Die freien Gitterspektraldichten

$$S_{\mathbf{R}\sigma}^{(0)}(x) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \delta(x + \mu_{\sigma}^{(0)} - \epsilon_{\mathbf{k}}) \quad (3.104)$$

sind identisch für alle Gittervektoren

$$\mathbf{R} = a(n_1 \vec{e}_1 + \dots + n_d \vec{e}_d); \quad n_l \in \mathbb{Z}, \quad (3.105)$$

die auf einer Schale symmetrie-äquivalenter Punkte des Gitters um den Ursprung liegen¹⁸. Damit läßt sich (3.103) in eine Summe über Gitterschalen Δ_n umschreiben und in jedem Schalenbeitrag separieren der wellenzahl- und energieabhängige Beitrag:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E) = U^2 \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_{\Delta_n \mathbf{k}} * \Sigma_{\Delta_n \sigma}^{(\text{II})}(E). \quad (3.106)$$

Die Schalendispersionen $\gamma_{\Delta_n \mathbf{k}}$ sind definiert als

$$\gamma_{\Delta_n \mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}_n \in \Delta_n} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_n} \quad (3.107)$$

und die energieabhängigen Schalenfaktoren als

$$\Sigma_{\Delta_n \sigma}^{(\text{II})}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz S_{\Delta_n \sigma}^{(0)}(x) S_{\Delta_n - \sigma}^{(0)}(y) S_{\Delta_n - \sigma}^{(0)}(z) \frac{F(x, y, z)}{E - x - y + z}. \quad (3.108)$$

Die Relevanz der Umformung der Selbstenergie in eine Summe über Schalen liegt in der Tatsache begründet, dass man die Summe nach endlich vielen Termen abbrechen kann und konvergierte Resultate erhält [132]. Um dies zu erreichen, müssen die Schalen angeordnet werden. Für ein Tight-Binding-Modell erscheint es auf den ersten

¹⁸Die Einheitsvektoren \vec{e}_i sollen hier immer ein kartesisches Koordinatensystem aufspannen. Man beachte aber, dass in kartesischen Koordinaten nicht für jeden Gittertyp alle Kombinationen der n_l erlaubt sind. So ist im kubisch-flächenzentrierten Gitter $(1, 0, 0)$ kein erlaubter Gittervektor (wohl aber im einfach-kubischen Gitter).

Blick sinnvoll, die Schalen nach der L^1 -Norm:

$$d^{(1)} = \sum_l |n_l| \quad (3.109)$$

anzuordnen, da diese ein direktes Maß für die minimal benötigten Hoppingprozesse zum Erreichen der Schale liefert. Unsere numerischen Tests ergaben aber eine deutlich bessere Konvergenz mit der L^2 -Norm (Abstand der Schale vom Ursprung). Die Norm $d^{(2)}$ reicht manchmal nicht aus, um zwei verschiedene Schalen richtig anzuordnen. So haben die einfach-kubischen Gittervektoren mit den Indizes $(2, 2, 1)$ und $(3, 0, 0)$ dieselbe L^2 -Norm, liegen aber auf zwei Symmetrie-disjunkten Schalen. Um für Schalen mit gleichem $d^{(2)}$ eine Ordnung zu erreichen, werden dann sukzessive höhere Normen ($p > 2$):

$$d^{(p)} = \left(\sum_l |n_l|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3.110)$$

verwendet. So unterscheiden sich die Gittervektoren $(2, 2, 1)$ und $(3, 0, 0)$ bereits in der L^3 -Norm und können in dieser angeordnet werden.

Es verbleibt die Berechnung der energieabhängigen Schalenfaktoren (3.108). In der Arbeit von Schweitzer und Czycholl [132] wurde vorgeschlagen, den (singulären) Energienenner in (3.108) durch seine Laplace-Darstellung:

$$\frac{1}{E - x - y + z} = -i \int_0^\infty d\lambda \exp(i\lambda(E - x - y + z)) \quad (3.111)$$

zu ersetzen. Mit dieser Ersetzung faktorisieren die drei Integrale in (3.108), man erhält aber ein zusätzliches Integral über λ . Die Auswertung dieses Integrals ist zwar möglich (siehe auch [131] für Details), ist aber numerisch ungünstig, da der Integrand langreichweitig und oszillatorisch ist. Um die in dieser Arbeit durchgeführten, selbstkonsistenten Rechnungen für beliebige Bandfüllungen zu ermöglichen, haben wir darum einen anderen Weg der Berechnung gewählt.

Mit Hilfe der Diracidentität (154) schreibt man zunächst für den Imaginärteil des (retardierten) Schalenbeitrags:

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma_{\Delta_n \sigma}^{(\text{II})}(E_{\mathbb{R}} + i0^+) = & -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \times \\ & \left\{ f_{-}(-x) S_{\Delta_n \sigma}^{(0)}(x) f_{-}(-y) S_{\Delta_n - \sigma}^{(0)}(y) f_{-}(x + y - E) S_{\Delta_n - \sigma}^{(0)}(x + y - E) \right. \\ & \left. + f_{-}(x) S_{\Delta_n \sigma}^{(0)}(x) f_{-}(y) S_{\Delta_n - \sigma}^{(0)}(y) f_{-}(-(x + y - E)) S_{\Delta_n - \sigma}^{(0)}(x + y - E) \right\}. \end{aligned} \quad (3.112)$$

Man erkennt, dass auf der rechten Seite zwei doppelte Faltungsintegrale über Funktionen mit endlichem Träger (die freien Gitterzustandsdichten haben die Breite W) durchzuführen sind. Diese können sehr effizient mit Hilfe einer schnellen Fouriertransformation (FFT) über das Faltungstheorem der Fouriertransformation berechnet werden. Zur konkreten Berechnung wurden die Gitterzustandsdichten vorab mit hoher Energieauflösung ($\Delta E \approx 1/400000 \text{ eV}$ für $W = 1 \text{ eV}$) berechnet und in Dateien gespeichert. Die eigentliche Faltung wurde dann mit Hilfe der hoch Optimierten

FFT-Bibliothek FFTW [31] durchgeführt.

Aus (3.112) folgt, dass der Imaginärteil der retardierten Schalenfaktoren ebenfalls nur auf einem endlichen Energieintervall von null verschieden ist. Kennt man den Imaginärteil der Selbstenergie auf diesem Intervall, so kann man mit Hilfe der Spektraldarstellung der Greenfunktion [101] die energieabhängigen Schalenfaktoren der Selbstenergie in der gesamten komplexen Ebene bestimmen:

$$\Sigma_{\Delta n \sigma}^{(\text{II})}(E) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{\text{Im} \Sigma_{\Delta n \sigma}^{(\text{II})}(E' + i0^+)}{E - E'}. \quad (3.113)$$

Damit haben wir einen effektiven Weg gefunden, die Selbstenergie für beliebige Werte von E in der komplexen Ebene zu berechnen. Für vorgegebene $\langle n_\sigma \rangle$ muss die beschriebene Rechnung wegen der Bedingung (3.102) nur einmal ausgeführt werden. Um Quasiteilchenzustandsdichten berechnen zu können, muss noch das (äußere) chemische Potential über die Bedingung:

$$n = \sum_{\sigma} \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d k \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ -\frac{1}{\pi} \frac{1}{E + i0^+ + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E + i0^+)} \right\} \quad (3.114)$$

bestimmt werden. Hierbei stößt man auf die nächste Schwierigkeit. Die Energieintegration erfolgt über eine stark gepeakte Funktion und ist numerisch nur unter großem Aufwand durchzuführen. Der für eine lokale Selbstenergie häufig angewandte Trick, die Wellenzahlintegration in eine (eindimensionale) Integration über die freie Zustandsdichte umzuwandeln und diese zuerst auszuführen, funktioniert hier nicht, da sich die \mathbf{k} -abhängige Selbstenergie nicht als Funktion der freien Dispersion $\epsilon_{\mathbf{k}}$ schreiben lässt.

Die Überwindung dieser numerischen Hürde gelingt mit Hilfe der von Ozaki [108] gefundenen Poldarstellung der Fermifunktion. Mit dieser lässt sich die Energieintegration in (3.114) eine Summe über Residuen an den Polstellen der Fermifunktion auf der imaginären Achse überführen. Die Poldarstellung von Ozaki ist dabei erstaunlich effektiv und es reichen selbst bei tiefen Temperaturen wenige hundert Polstellen aus, um eine exzellente Approximation des Integrals zu erhalten. Insbesondere konvergiert die Summe sehr viel schneller, als die bekannte Matsubarasummation. Diese Eigenschaften wurden z.B. in [73] ausgenutzt, um die problematische analytische Fortsetzung der Matsubara-Greenfunktion auf die reelle Achse, wie sie z.B. in numerischen Verfahren zur Lösung von Impurity-Problemen auftritt [72], zu umgehen. Die Einzelheiten der Ozakimethode sind im Anhangskapitel 8.5 zu finden.

3.3.3 Modifizierte Störungstheorie

Die bisher vorgestellten, approximativen Theorien zur Beschreibung der Physik des Hubbardmodells haben ihre Stärken in unterschiedlichen Parameterbereichen. Die SDA folgt aus einem Zwei-Pol-Ansatz und liefert Anregungsenergien, die in Einklang mit der Theorie starker Kopplung ($U \gg W$) nach Harris und Lange stehen. Die SDA liefert aber keinerlei Lebensdauer-effekte, wie sie auf Grund von Elektron-Elektron-Streuung zu erwarten wären.

Die SOPT ging dagegen aus einer störungstheoretischen Entwicklung in U hervor

und sollte demnach gute Ergebnisse für den Bereich ($U \ll W$) liefern. Es wäre wünschenswert, eine einheitliche, zwischen schwachen und starken Kopplungen interpolierende Theorie zu haben. Mit diesem Ziel wurde der folgende Ansatz für eine modifizierte Störungstheorie (englisch: modified perturbation theory - MPT) verwendet:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MPT}}(E) = -z_\sigma \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{a_{\mathbf{k}\sigma} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E)}{1 - b_{\mathbf{k}\sigma} \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E)}. \quad (3.115)$$

Kajuter und Kotliar [69] haben einen solchen Selbstenergieansatz zur Lösung des Single-Impurity-Andersonmodells (SIAM) vorgeschlagen. Um die auftretenden Konstanten a und b festzulegen (für das SIAM tragen diese keine \mathbf{k} -Abhängigkeit), verwendeten sie die ersten zwei Spektralmomente und den Grenzfall des atomaren Limes. Diese Methode wurde dann von Potthoff et. al. [113] so erweitert, dass die ersten vier Spektralmomente der Spektraldichte exakt reproduziert werden. Hier soll nun der obige Ansatz direkt zur approximativen Lösung des (endlichdimensionalen) Hubbardmodells genutzt werden. Um die Konstanten $a_{\mathbf{k}\sigma}, b_{\mathbf{k}\sigma}$ in (3.115) zu bestimmen, gehen wir von der Hochenergieentwicklung der Selbstenergie:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}}{E^m} \quad (3.116)$$

aus. Wie im Anhangskapitel 6 gezeigt wird, können die Koeffizienten in (3.116) aus den Momenten der Spektraldichte über die Beziehungen (190) berechnet werden. Für die ersten drei Koeffizienten folgt aus den ersten vier Spektralmomenten des Hubbardmodells (220):

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = -z_\sigma \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle \quad (3.117a)$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \quad (3.117b)$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \left(t_0 - \mu - z_\sigma \frac{B}{2} + U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \right) + U^2 B_{\mathbf{k}-\sigma}. \quad (3.117c)$$

Um die rechte Seite von (3.115) ebenfalls entwickeln zu können, benötigen wir zunächst die Hochenergieentwicklung des Beitrags aus der SOPT:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{D_{\mathbf{k}\sigma}^{(m)}}{E^m}. \quad (3.118)$$

Für die ersten Koeffizienten dieser Entwicklung ergibt sich aus (3.103):

$$D_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle^{(0)} (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle^{(0)}) = C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}, \quad (3.119a)$$

$$D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = U^2 \langle e_{-\sigma} \rangle^{(0)} \left(2 \langle n_\sigma \rangle^{(0)} - 1 \right) \quad (3.119b)$$

$$- U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle^{(0)} \left((\mu_\sigma^{(0)} - t_0) (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle^{(0)}) + (\mu_{-\sigma}^{(0)} - t_0) (1 - 2 \langle n_\sigma \rangle^{(0)}) \right)$$

$$- U^2 \sum_{\mathbf{R} \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} t_{\mathbf{R}} \langle n_{\mathbf{R}-\sigma} \rangle^{(0)} \left(2 \langle n_{\mathbf{R}\sigma} \rangle^{(0)} + \langle n_{\mathbf{R}-\sigma} \rangle^{(0)} \right)$$

3 Das Hubbardmodell

mit

$$\langle n_{\mathbf{R}\sigma} \rangle^{(0)} = \int dE f_{-}(E) S_{\mathbf{R}\sigma}^{(0)}(E), \quad (3.120a)$$

$$\langle e_{\mathbf{R}\sigma} \rangle^{(0)} = \int dE E f_{-}(E) S_{\mathbf{R}\sigma}^{(0)}(E), \quad (3.120b)$$

und $\langle e_{-\sigma} \rangle^{(0)} = \langle e_{(\mathbf{R}=0)\sigma} \rangle^{(0)}$.

Mit diesem Resultat können wir die rechte Seite von (3.115) bis zur Ordnung $\mathcal{O}(1/E^2)$ entwickeln und finden für die Koeffizienten:

$$a_{\mathbf{k}\sigma} = 1; \quad b_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} - D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{(D_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^2}. \quad (3.121)$$

Damit ist die MPT-Selbstenergie festgelegt:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MPT}}(E) = -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \left(\left[\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E) \right]^{-1} + \frac{D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} - C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{(C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^2} \right)^{-1}. \quad (3.122)$$

Es kann nun gezeigt werden, dass die MPT für eine Reihe von Grenzfällen des Hubbardmodells korrekte Ergebnisse liefert.

Die Grenzfälle $U = 0$, $n = 0$ und $n = 2$ werden trivial erfüllt.

Im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes ($t_{ij} \rightarrow 0$) reduzieren sich die freien Gitterspektraldichten (3.104) zu

$$S_{\mathbf{R}\sigma}^{(0)}(x) \xrightarrow{W \rightarrow 0} \delta_{\mathbf{R},0} \delta(x + \mu_{\sigma}^{(0)} - t_0). \quad (3.123)$$

Setzt man das in die SOPT-Selbstenergie (3.94) ein, so erhält man für diese:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{II})}(E) \xrightarrow{W \rightarrow 0} \frac{U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{E + \mu_{\sigma}^{(0)} - t_0}. \quad (3.124)$$

Für die Koeffizienten der Hochenergieentwicklungen ergibt sich:

$$D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} \xrightarrow{W \rightarrow 0} -U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) (\mu_{\sigma}^{(0)} - t_0) \quad (3.125)$$

und, da die spinabhängige Bandverschiebung (3.85) und Bandschwerpunktskorrektur (3.86) im Grenzfall des unendlich schmalen Bandes verschwinden,

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} \xrightarrow{W \rightarrow 0} U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) (t_0 - \mu - z_{\sigma} \frac{B}{2} + U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)). \quad (3.126)$$

Durch Einsetzen der Zwischenergebnisse (3.124-3.126) in (3.122) erhalten wir schließlich für die MPT-Selbstenergie im betrachteten Grenzfall:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{\text{MPT}}(E) \xrightarrow{W \rightarrow 0} -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \frac{U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{E + z_{\sigma} \frac{B}{2} - t_0 + \mu - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}. \quad (3.127)$$

Dies ist in der Tat die exakte Form der Selbstenergie für den „atomaren“ Grenzfall des Hubbardmodells, die wir bereits in Kapitel 3.2.2 (Gleichung: (3.19)) abgeleitet hatten.

Entwickelt man die MPT-Selbstenergie in Potenzen von U , so ergibt sich das Resultat der SOPT (3.97) mit Korrekturen, die mindestens von der Ordnung $\mathcal{O}(U^3)$ sind. Die MPT wird darum für kleine $U \ll W$ gute Ergebnisse liefern. Insbesondere enthält sie Quasiteilchendämpfung und sollte typisches Fermiflüssigkeitsverhalten zeigen [132].

Die MPT erfüllt auf Grund ihrer Konstruktionsmethode automatisch die ersten vier Spektralmomente des Hubbardmodells. Diese Eigenschaft hat die MPT mit der SDA gemein, die eine klassische Theorie für den Bereich starker Kopplung ($U \gg W$) darstellt und in Einklang mit den Ergebnissen von Harris und Lange [46] steht, die wir in den Kapiteln 3.2.3 und 3.2.4 rekapituliert haben. Demnach wird die MPT gerade für große Energien ($|E - \mu| \gg 1$) korrekt sein. Dabei wird im Besonderen die Lage und Form des oberen (unteren) Hubbard-Bandes für $n < 0$ ($n > 0$) im Bereich starker Kopplung von der Theorie korrekt wiedergegeben werden - ein Punkt, in dem die SOPT bekanntermaßen versagt.

3.4 Thermodynamische Größen

3.4.1 Statische paramagnetische Suszeptibilität

Die bisher entwickelte Theorie erlaubt die selbstkonsistente Berechnung der Magnetisierung in einem eventuell vorliegenden ferromagnetischen Bereich des Modells. Um das System auf die Existenz eines solchen Bereiches zu testen, kann man die statische paramagnetische Suszeptibilität verwenden, die folgendermaßen definiert ist:

$$\chi^{(p)}(T) = \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \langle n_{\sigma} \rangle |_{T, B=0, \langle n_{\uparrow} \rangle = \langle n_{\downarrow} \rangle}. \quad (3.128)$$

Die Nulldurchgänge der inversen Suszeptibilität markieren Punkte im Phasendiagramm, an denen das (paramagnetische) System anfällig für einen ferromagnetischen Phasenübergang wird [65].

Um die Suszeptibilität auswerten zu können, muss in (3.128) die Ableitung nach dem B -Feld ausgewertet werden. Die explizite Rechnung ist recht langwierig und führt auf eine Suszeptibilität, die ein Funktional der selbstkonsistent bestimmten paramagnetischen Selbstenergie darstellt. Aus diesem Grund habe ich die komplette Rechnung im Anhangskapitel 8.6 ausgeführt.

3.4.2 Die optische Leitfähigkeit

Der Tensor der optischen Leitfähigkeit ist in linearer Antworttheorie durch die retardierte Greenfunktion:

$$\sigma^{\beta\alpha}(E) = -\langle\langle \hat{j}^{\beta}; \hat{P}^{\alpha} \rangle\rangle_E \quad (3.129)$$

gegeben [100]. Hierbei bezeichnet \hat{j}^{β} die kartesischen Komponenten des Stromdichteoperators und \hat{P}^{α} die Komponenten des elektrischen Dipolmomentenoperators. Unter Ausnutzung der Beziehung $\hat{\mathbf{j}} = -i\frac{1}{N}[\hat{\mathbf{P}}, \mathcal{H}]_{-}$ kann dies über die Bewegungsgleichung von (3.129) zu

$$\sigma^{\beta\alpha}(E) = -\frac{\langle[\hat{j}^{\beta}, \hat{P}^{\alpha}]_{-}\rangle}{E} + iN \frac{\langle\langle \hat{j}^{\beta}; \hat{j}^{\alpha} \rangle\rangle}{E} \quad (3.130)$$

umgeformt werden.

Für ein Gittermodell mit Tight-Binding-Dispersion sind die Operatoren durch $\hat{\mathbf{P}} = q \sum_{i,\sigma} \mathbf{R}_i \hat{n}_{i\sigma}$ und $\hat{\mathbf{j}} = -\frac{iq}{N} \sum_{lm,\sigma} t_{lm} (\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m) c_{l\sigma}^{\dagger} c_{m\sigma}$ gegeben [101]. Mit diesen Operatoren kann der erste Term in (3.130) berechnet werden. Für ein einfach-kubisches Gitter ergibt dessen Realteil die Leitfähigkeit des nicht wechselwirkenden Elektronensystems (Drude-Gewicht):

$$\text{Re}(\sigma_D^{\beta\alpha}(E + i0^+)) = -\pi \delta_{\alpha\beta} \delta(E) \frac{2tq^2}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \cos(k_{\alpha}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle. \quad (3.131)$$

Der zweite Term in (3.130), die Stromdichte-Stromdichte-Greenfunktion, enthält den Einfluss von Korrelationseffekten. Diese kann mit Hilfe der Definition des Stromdich-

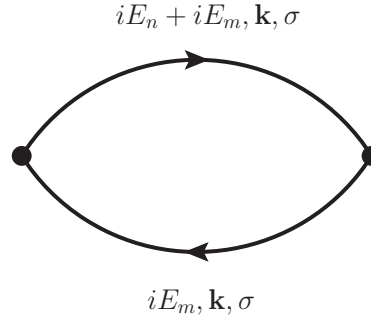


Abbildung 3.7: Der Diagrammbeitrag nullter Ordnung zur Auswertung der Besetzungszahl-Besetzungszahl-Greenfunktion.

teoperators folgendermaßen umgeformt werden:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \hat{j}^\beta; \hat{j}^\alpha \rangle\rangle &= -\frac{q^2}{N^2} \sum_{\substack{l,m,n,o \\ \sigma\sigma'}} t_{lm} R_{lm}^\beta t_{no} R_{no}^\alpha \langle\langle c_{l\sigma}^+ c_{m\sigma}; c_{n\sigma'}^+ c_{o\sigma'} \rangle\rangle \\
 &= -\frac{q^2}{N^2} \sum_{\substack{l,m,n,o \\ \sigma\sigma'}} \frac{1}{N^2} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} t_{lm} R_{lm}^\beta e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{lm}} t_{no} R_{no}^\alpha e^{i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{no}} \langle\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}; \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle\rangle \\
 &= \frac{q^2}{N^2} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{k}' \\ \sigma\sigma'}} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k'_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}'}) \langle\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}; \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle\rangle.
 \end{aligned} \tag{3.132}$$

Die somit zu berechnende Besetzungszahl-Besetzungszahl-Greenfunktion soll in dieser Arbeit auf dem „Ein-Schleifen“-Niveau einer diagrammatischen Entwicklung approximiert werden. Das hierfür auszuwertende Diagramm ist in Abbildung 3.7 gezeigt. Nach den Regeln der Diagrammanalyse [100] ergibt sich für dieses unter Beachtung von Spin- und Impulserhaltung am Vertexpunkt:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma}; \hat{n}_{\mathbf{k}'\sigma'} \rangle\rangle_{E_n} &\approx \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \frac{1}{\beta} \sum_m G_{\mathbf{k}\sigma}(iE_m) G_{\mathbf{k}\sigma}(iE_n + iE_m) \\
 &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \int \int dx dy S_{\mathbf{k}\sigma}(x) S_{\mathbf{k}\sigma}(y) \frac{f_-(x) - f_-(y)}{iE_n + x - y} \\
 &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} \int dx f_-(x) S_{\mathbf{k}\sigma}(x) (G_{\mathbf{k}\sigma}(x + iE_n) + G_{\mathbf{k}\sigma}(x - iE_n)).
 \end{aligned}$$

Man beachte, dass es sich hierbei schon um ein renormiertes Resultat handelt, da die zur Auswertung des „nackten“ Diagramms eigentlich benötigten freien Matsubara-Greenfunktionen durch volle Greenfunktionen (mit Selbstenergie) ersetzt wurden. Mit diesem Ergebnis kann nun der Korrelationsanteil der Leitfähigkeit (3.130) aus-

3 Das Hubbardmodell

gewertet werden:

$$\begin{aligned}
\operatorname{Re}(\sigma_{jj}^{\beta\alpha}(E + i0^+)) &= \operatorname{Re} \left\{ \frac{iq^2}{(E + i0^+)} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) S_{\mathbf{k}\sigma}(x) \right. \\
&\quad \times \left. \left(G_{\mathbf{k}\sigma}(x + E + i0^+) + G_{\mathbf{k}\sigma}(x - E - i0^+) \right) \right\} \\
&= -2q^2 \delta(E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) (\operatorname{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(x) \operatorname{Re} G_{\mathbf{k}\sigma}(x)) \quad (3.133) \\
&\quad + \frac{\pi q^2}{E} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) S_{\mathbf{k}\sigma}(x) (S_{\mathbf{k}\sigma}(x + E) - S_{\mathbf{k}\sigma}(x - E)).
\end{aligned}$$

Der erste Term dieses Resultats kann zunächst zu:

$$\begin{aligned}
-2q^2 \delta(E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) (\operatorname{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(x) \operatorname{Re} G_{\mathbf{k}\sigma}(x)) \\
= -q^2 \delta(E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) \operatorname{Im} (G_{\mathbf{k}\sigma}(x))^2
\end{aligned}$$

umgeformt werden. Für eine wellenzahlunabhängige Selbstenergie folgt daraus unter der Voraussetzung, dass der Massentensor¹⁹ diagonal ist (dies ist für die Tight-Binding-Dispersion des einfach-kubischen Gitters gegeben):

$$\begin{aligned}
-q^2 \delta(E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) \operatorname{Im} (G_{\mathbf{k}\sigma}(x))^2 \quad (3.135) \\
= -q^2 \delta(E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) (\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) \frac{1}{\partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}} \partial_{k_\alpha} \operatorname{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}(x) \\
= -\pi q^2 \delta(E) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\alpha} \partial_{k_\beta} \epsilon_{\mathbf{k}}) \int dx f_-(x) S_{\mathbf{k}\sigma}(x) \\
= -\delta_{\alpha\beta} \pi \delta(E) q^2 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\partial_{k_\alpha}^2 \epsilon_{\mathbf{k}}) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle, \\
= \pi \delta_{\alpha\beta} \delta(E) \frac{2tq^2}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \cos(k_\alpha) \langle \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} \rangle.
\end{aligned}$$

Dieser Term hebt also gerade den Beitrag des Drudeterms (3.131) auf. Die Wellenzahlunabhängigkeit der Selbstenergie wurde beim Übergang von der ersten zur zweiten Zeile benutzt, die dritte Zeile folgt dann durch partielle Integration. Für eine \mathbf{k} -abhängige Selbstenergie gilt das nicht mehr ohne Weiteres. Wir werden hier aber annehmen, dass die Beziehung auch für die wellenzahlabhängige Selbstenergie gilt und nur den Korrelationsanteil zur Leitfähigkeit, wie er aus dem zweiten Term

¹⁹Der inverse (effektive) Massentensor ist definiert als:

$$((m^*)^{-1})_{ij} = \frac{\partial^2 \epsilon_{\mathbf{k}}}{\partial k_i \partial k_j}. \quad (3.134)$$

in (3.133) folgt:

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}(\sigma_C^{\beta\alpha}(E + i0^+)) = \\ \delta_{\alpha\beta} \frac{\pi q^2}{N} \sum_{\mathbf{k}\sigma} v_{\mathbf{k}\alpha} v_{\mathbf{k}\beta} \int dx S_{\mathbf{k}\sigma}(E + x) S_{\mathbf{k}\sigma}(x) \frac{f_-(x) - f_-(E + x)}{E}, \end{aligned} \quad (3.136)$$

auswerten. Die Deltafunktion $\delta_{\alpha\beta}$ ergibt sich in diesem Ausdruck, weil die Gruppengeschwindigkeit: $v_{\mathbf{k}\alpha} = \partial_{k_\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}}$ im einfach-kubischen Gitter eine ungerade Funktion bezüglich k_α ist, der Restausdruck aber eine gerade Funktion. Es sei noch darauf hingewiesen, dass dieses approximative Ergebnis im Grenzfall des unendlichdimensionalen Gitters exakt wird, da dann die Selbstenergie eine lokale Größe ist, und alle höheren Vertexkorrekturen verschwinden [115]. Die Vernachlässigung von Vertexkorrekturen im endlichdimensionalen Fall mit nichtlokaler Selbstenergie kann nicht streng gerechtfertigt werden. So kann gezeigt werden, dass auf dem hier benutzten Level der Approximation bestimmte Ward-Identitäten verletzt werden [128]. Wir werden darum im Ergebnisteil nur Kurven für das dreidimensionale Gitter zeigen, für das die Wellenzahlabhängigkeit der Selbstenergie insbesondere an der Fermienergie nicht so ausgeprägt ist. Für weitergehende Ausführungen zu diesem Punkt sei der interessierte Leser auf die Spezialliteratur zu diesem Thema verwiesen [8].

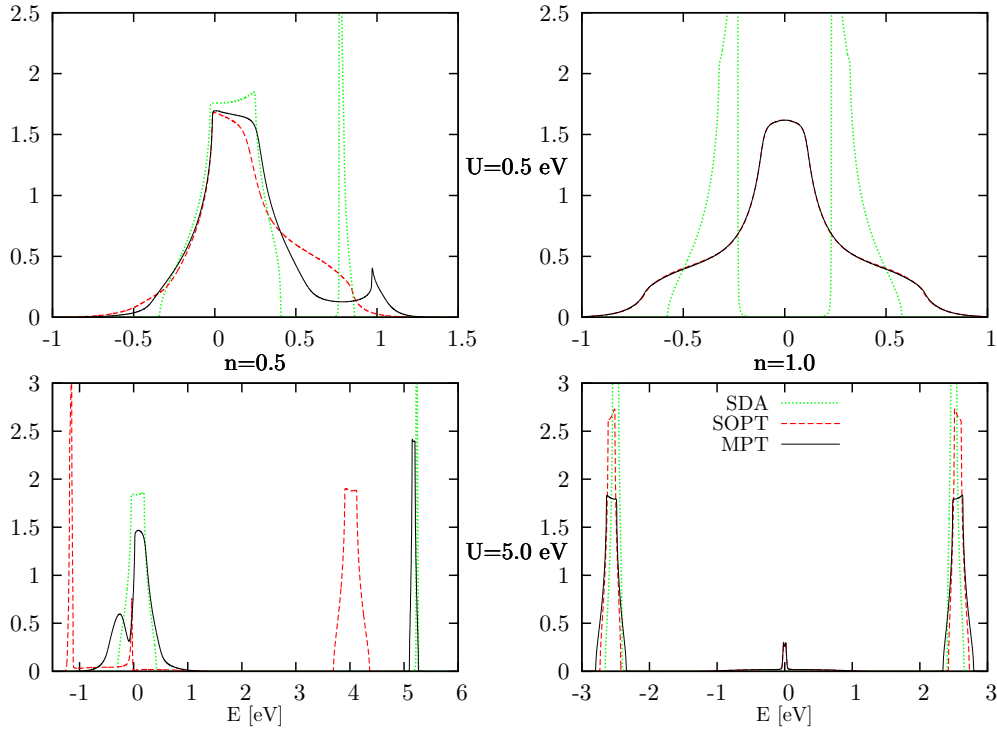


Abbildung 3.8: Quasiteilchenzustandsdichte berechnet mit verschiedenen Näherungsverfahren (grün-gepunktet: SDA, rot-gestrichelt: SOPT, schwarz-durchgezogen: MPT). Die obere Zeile zeigt den Fall schwacher ($U/W = 0.5$) und die untere den Fall stärkerer Wechselwirkung ($U/W = 5$). Die Spalten unterscheiden sich in der Bandfüllung (links: $n = 0.5$, rechts: $n = 1$ (Halbfüllung)). Parameter: $W = 1\text{eV}$ und $T = 10\text{K}$.

3.5 Resultate

Die in dieser Arbeit entwickelte modifizierte Störungstheorie (MPT), deren Selbstenergie nichtlokal und damit wellenzahlabhängig ist, erlaubt die Beschreibung homogener Phasen (paramagnetisch/ferromagnetisch). Beginnen werden wir mit der Diskussion der spektralen Eigenschaften des Hubbardmodells in der paramagnetischen Phase. Dies geschieht mit dem Wissen, dass das Hubbardmodell im Prinzip in bestimmten Parameterbereichen nicht paramagnetisch sein sollte. So erwartet man zum Beispiel nach dem in Kapitel 3.2.3 abgeleiteten, effektiven Hamiltonoperator (3.40) im dreidimensionalen Hubbardmodell bei tiefen Temperaturen und Halbfüllung eine antiferromagnetische Phase. Diese Schwäche teilt die hier entwickelte Theorie mit anderen Selbstenergiezugängen, wie z.B. DMFT-Rechnungen und ein Vergleich mit diesen unterstreicht die Nützlichkeit der gezeigten Ergebnisse.

3.5.1 Vergleich der Näherungsverfahren

Im Kapitel 3.3 wurden drei verschiedene Selbstenergienäherungen für das Hubbardmodell vorgestellt. Der Spektraldichteansatz (SDA) reproduziert für $U \gg W$ die Anregungsenergien, wie sie aus der Entwicklung in $1/U$ nach Harris und Lange folgten. Dagegen ergab sich die Störungstheorie zweiter Ordnung (SOPT) aus einer diagrammatischen Entwicklung in U und sollte für $U \ll W$ gute Ergebnisse liefern. Die modifizierte Störungstheorie (MPT) kombiniert die Vorzüge der beiden vorgenannten Verfahren und interpoliert zwischen den Grenzfällen schwacher und starker Coulombabstoßung. Das sollte an den Quasiteilchenzustandsdichten (QDOS) abzulesen sein.

In Abbildung 3.8 sind die QDOS, die mit den drei Methoden berechnet wurden, für zwei verschiedene Bandfüllungen n (Spalten) und zwei Wechselwirkungsstärken U (Zeilen) gezeigt. Als zugrunde liegendes Gitter wurde das einfach-kubische Gitter (SC) mit Hopping nur zu nächsten Nachbarn gewählt. Betrachten wir zunächst den Fall schwacher Wechselwirkung ($U/W = 0.5$, obere Zeile). Bei Viertelfüllung ($n = 0.5$) stimmen die QDOS der MPT (schwarze Linie) und der SOPT (rote, gestrichelte Linie) unterhalb des Ferminiveaus²⁰ gut überein. Dagegen zeigt die SDA-QDOS in diesem Bereich leichte Abweichungen insbesondere in der Position der unteren Bandkante und in der Zustandsdichte am Ferminiveau. Oberhalb des Ferminiveaus zeigen sich Abweichungen zwischen MPT und SOPT. Man erkennt, dass die MPT hier eine Tendenz in Richtung SDA-QDOS entwickelt. So ist die QDOS der MPT im Bereich des unteren SDA-Bandes im Vergleich zur SOPT erhöht und dann im Bereich der SDA-Bandlücke niedriger. An der oberen Bandkante bildet sich in der MPT eine gepeakte Struktur heraus, die mit dem oberen SDA-Band assoziiert werden kann, allerdings energetisch zu diesem etwas verschoben liegt.

Bei Halbfüllung stimmen die Zustandsdichten der MPT und SOPT perfekt überein. Sie zeigen die erwartete Elektron-Loch-Symmetrie des Hubbardmodells und bestehen aus einem zentralen Peak und breiten, langsam abfallenden Schultern. Die SDA zeigt deutliche Abweichungen hiervon. So bildet sich z.B. in der SDA eine Bandlücke (Mottisolator) aus, die man für schwache Wechselwirkungen nicht erwartet. Das untere und obere Hubbardband sind in der SDA stark strukturiert und weichen deutlich von der freien SC-Zustandsdichte ab.

Der Fall starker Kopplung ($U/W = 5$) ist in der unteren Zeile der Abbildung 3.8 gezeigt. Bei Viertelfüllung stimmt die energetische Lage des unteren und oberen Hubbardbandes der SDA und der MPT nun gut überein. Es zeigen sich jedoch deutliche Unterschiede in der jeweiligen Form der Bänder. So ist das untere Hubbardband der MPT breiter und stärker strukturiert als das an die freie SC-Zustandsdichte erinnernde untere SDA-Band. Das obere Hubbard-Band ist in der SDA sehr schmal im Vergleich zur freien Bandbreite ($W = 1\text{eV}$), ein Effekt, der in der MPT nicht so stark auftritt. Die SOPT zeigt starke Abweichungen von den anderen Theorien und liefert im Fall starker Kopplung, verglichen mit den Erkenntnissen, die wir in Kapitel 3.2.4 gewonnen haben, inkonsistente Resultate für das nicht halbgefüllte Band.

Bei Halbfüllung zeigen die drei Methoden eine gute Übereinstimmung in der energetischen Lage des unteren und oberen Hubbardbandes. MPT und SOPT haben eine zusätzliche Resonanz (Kondo-Peak) am Fermi-niveau, ein Punkt, auf den wir im

²⁰Das Fermi-niveau liegt in allen gezeigten Abbildungen bei $E = 0\text{ eV}$.

nächsten Abschnitt näher eingehen werden.

Zusammenfassend stellen wir fest, dass die MPT tatsächlich Elemente der SOPT und der SDA enthält und zwischen diesen interpoliert. Es gibt aber auch Abweichungen von diesen Theorien selbst in deren jeweils angenommenen Gültigkeitsbereichen. Um hier mehr Klarheit zu erreichen, wollen wir nun die spektralen Eigenschaften, wie sie sich im Rahmen der MPT für das Hubbardmodell ergeben, näher untersuchen.

3.5.2 Spektrale Eigenschaften des dreidimensionalen Hubbardmodells

In Abbildung 3.9 ist die paramagnetische QDOS des dreidimensionalen (SC) Hubbardmodells bei tiefer Temperatur ($T = 10\text{K}$) für zwei verschiedene Bandfüllungen und verschiedene Wechselwirkungsstärken U gezeigt. Die Berechnungen wurden, wenn nicht anders angegeben, mit der voll wellenzahlabhängigen MPT-Selbstenergie durchgeführt.

Man erkennt eine deutlich ausgeprägte Drei-Peak-Struktur der QDOS. Das untere und das obere Hubbardband sind in der Größenordnung U voneinander separiert. Zusätzlich erscheint eine Kondoresonanz am Fermi-niveau. Das spektrale Gewicht des Kondopeaks reduziert sich mit steigendem U , bleibt aber auch für sehr große U endlich. Daraus ergibt sich, dass die MPT keinen klaren Metall-Isolator-Übergang (englisch: metal-insulator transition (MIT)) bei Halbfüllung liefert, wie er sich in DMFT-Rechnungen für das unendlichdimensionale Hubbardmodell [115] zeigt. Um diesen Punkt noch etwas näher zu beleuchten, ist in Abbildung 3.10 die renormierte inverse effektive Masse der Quasiteilchen:

$$\frac{m}{m^*} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [1 - \text{Re} \Sigma_{\mathbf{k}}(E)]^{-1} \quad (3.137)$$

gezeigt. Obwohl sich kein klarer MIT ausmachen lässt, sollte das System oberhalb von $U/W \approx 10$ wegen der großen effektiven Masse der Quasiteilchen praktisch ein Isolator sein. Dieses Ergebnis ist in Übereinstimmung mit den Resultaten, die Kakehashi und Fulde im Rahmen ihrer nichtlokalen Theorie finden[70]. Es soll an dieser Stelle nicht unerwähnt bleiben, dass die MPT, wenn sie zur Lösung des Impurity-Problems in einer DMFT-Rechnung benutzt wird, sehr wohl einen MIT liefert [82]. Wir wollen nun die Effekte der Wellenzahlabhängigkeit der Selbstenergie untersuchen. Dazu ist in Abbildung 3.9 auch das Ergebnis der lokalen MPT²¹ gezeigt. Im Vergleich mit dieser zeigt die voll \mathbf{k} -abhängige Rechnung deutliche Abweichungen. Zunächst fällt auf, dass nur die lokale Theorie das Luttingertheorem erfüllt. Dieses besagt, dass die Zustandsdichte einer Fermiflüssigkeit am Fermi-niveau denselben Wert wie im wechselwirkungsfreien System hat. Die Wellenzahlabhängigkeit führt zu einer Reduktion der Zustandsdichte am Fermi-niveau, die mit steigendem U zunimmt. Dies ist nicht verwunderlich, denn das Luttinger-Ward-Argument, das dem Theorem zugrunde liegt, gilt nur für lokale Selbstenergien [94, 84].

Ein weiterer, sofort ins Auge fallender Effekt der wellenzahlabhängigen Selbstenergie ist das Auftreten von Spitzen im oberen ($n = 0.75, 1.0$) und unteren ($n = 1$) Hubbardband bei mittleren Wechselwirkungsstärken ($U/W \approx 1$). Um diesen Effekt

²¹ „Lokal“ bezieht sich hierbei auf den Anteil $\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{(\text{I})}(E)$ der MPT Selbstenergie (3.122), der aus der zweiten Ordnung Störungstheorie stammt. Für diesen wurde nur der \mathbf{k} -unabhängige Beitrag der nullten Schale mitgenommen.

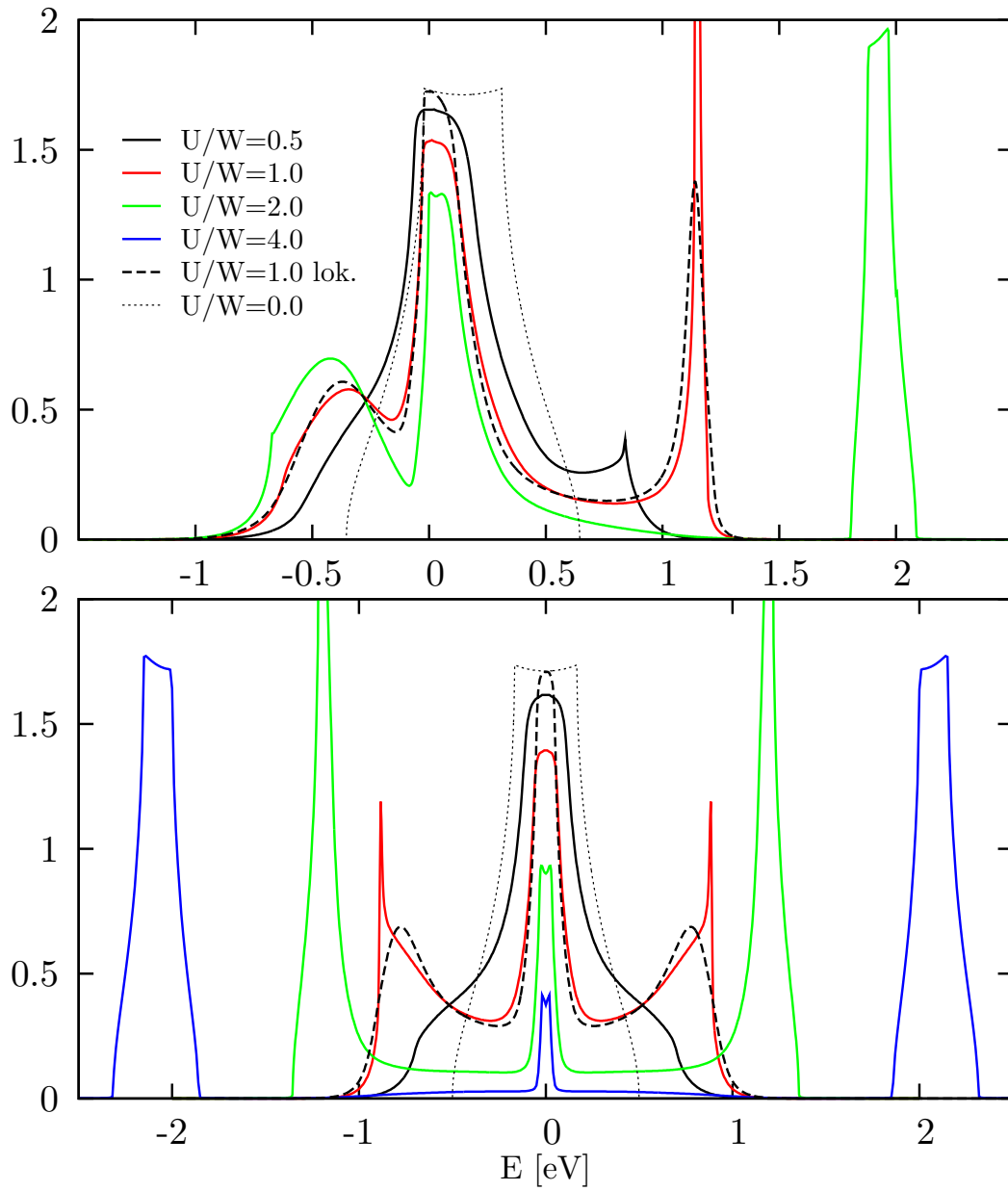


Abbildung 3.9: Quasiteilchenzustandsdichte des einfach-kubischen Gitters für verschiedene Wechselwirkungsstärken U/W . Die durchgezogenen Linien zeigen die Ergebnisse der voll \mathbf{k} -abhängigen MPT-Selbstenergie. Die gestrichelten Linien die der lokalen Näherung und den wechselwirkungsfreien Fall. Parameter: $T = 10$ K, oben: $n = 0.75$, unten: $n = 1$.

3 Das Hubbardmodell

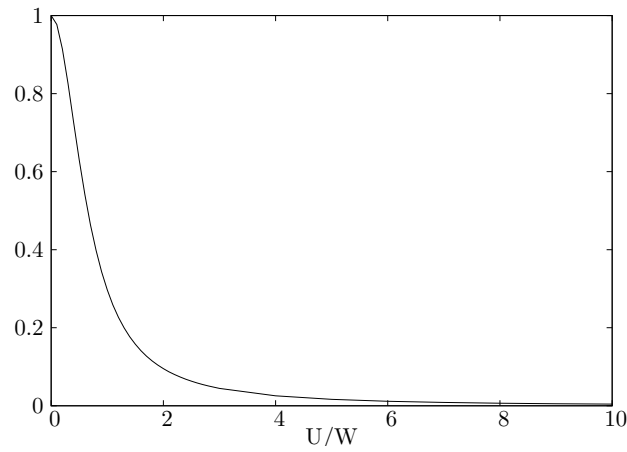


Abbildung 3.10: Die (auf die Elektronenmasse normierte) inverse effektive Masse der Quasiteilchen als Funktion der Wechselwirkung U . Parameter: $W = 1$ eV, $T = 10$ K und $n = 1$.

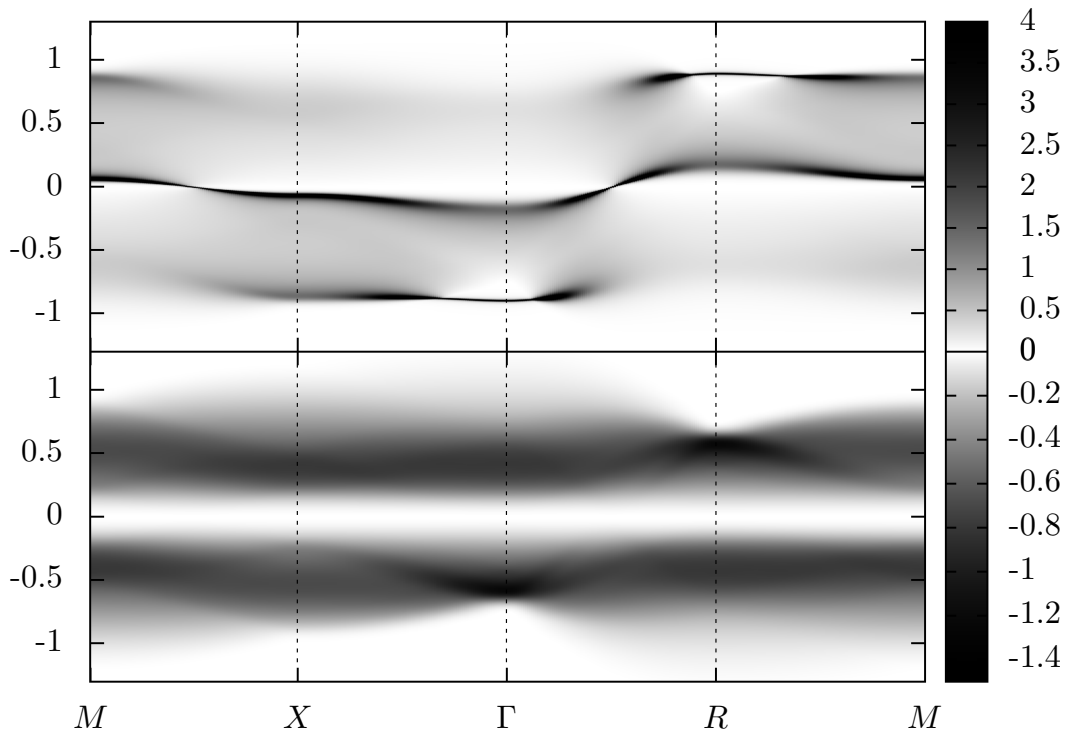


Abbildung 3.11: Spektraldichte (oben) und Imaginärteil der Selbstenergie (unten) entlang der Hochsymmetrieachsen in der ersten Brillouinzone des einfach-kubischen Gitters: $M(\pi, \pi, 0) \rightarrow X(\pi, 0, 0) \rightarrow \Gamma(0, 0, 0) \rightarrow R(\pi, \pi, \pi) \rightarrow M$. Die numerischen Werte wurden durch Graustufen kodiert und können dem Farbbalken rechts neben der jeweiligen Abbildung entnommen werden. Parameter: $n = 1$, $U = 1$ eV, $W = 1$ eV und $T = 10$ K.

erklären zu können, ist es hilfreich, einen Blick auf die Spektraldichte und den Imaginärteil der Selbstenergie zu werfen. Diese sind in Abbildung 3.11 für $n = 1, U = 1$ entlang der Hochsymmetrieachsen in der ersten Brillouinzone gezeigt. Die Selbstenergie zeigt das typische Verhalten einer Fermiflüssigkeit: ihr Imaginärteil ist negativ und fast null (null nur bei $T = 0$ K) am Ferminiveau und sinkt quadratisch mit steigendem Energiebetrag. Das führt zu ansteigenden Dämpfungseffekten in der Dispersion des Kondopeaks. Die Dispersion hat ungefähr den Verlauf des freien Bandes, allerdings mit renormierter Bandbreite. Entsprechend findet man die stärkste Quasiteilchendämpfung am Γ - und am R -Punkt, wo auch die freie Dispersion ihre Maximalwerte annimmt. An diesen Punkten zeigt die Selbstenergie einen im Vergleich zum Rest der gezeigten \mathbf{k} -Werte sehr viel steileren Abfall, um dann bei einer Energie von $E \approx -0.5$ eV (Γ -Punkt) bzw. $E \approx 0.5$ eV (R -Punkt) abrupt auf null zu steigen. Das hat zur Folge, dass Quasiteilchenzustände, die oberhalb dieser Energieschwelle liegen, keine Dämpfung erfahren und somit eine unendlich lange Lebensdauer besitzen. Dieser Effekt ist in der Spektraldichte klar zu erkennen. Im unteren Hubbardband erscheint am Γ -Punkt eine „Brücke“ stark gepeakter Zustände und dasselbe gilt für das obere Hubbardband am R -Punkt. Diese Zustände sind die Ursache für die in der QDOS auftretenden Spitzen. Einen ähnlichen Effekt kann man auch in den Rechnungen zur SOPT von Schweitzer und Czycholl [132] und in den Ergebnissen, die Kakehashi und Fulde mit Hilfe einer Projektionsoperatormethode [70] erhalten haben, beobachten. Allerdings sind die Spitzen hier sehr viel ausgeprägter als in den genannten Arbeiten. Dies kann wahrscheinlich auf die höhere numerische Genauigkeit, die in dieser Arbeit verwendet wurde, zurückgeführt werden.

Erhöht sich die Temperatur, so treten die Dämpfungserscheinungen stärker hervor. Um dies zu verdeutlichen, ist in Abbildung 3.12 die Kondoresonanz bei verschiedenen Temperaturen gezeigt. Mit ansteigender Temperatur wird sie immer mehr reduziert und tendiert bei höheren Temperaturen dazu, gänzlich zu verschwinden. Die Ursache hierfür ist in dem mit steigender Temperatur ebenfalls ansteigenden negativen Imaginärteil der Selbstenergie am Ferminiveau, wie er in der eingesetzten Abbildung gezeigt ist, zu finden. Für tiefe Temperaturen zeigt dieser das aus der Theorie der Fermiflüssigkeiten bekannte Verhalten ($\sim T^2$), um dann bei höheren Temperaturen linear anzusteigen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass die Spektraldichte des dreidimensionalen Hubbardmodells deutliche Wellenzahleffekte zeigt. Für das zweidimensionale Quadratgitter sollten diese Effekte auf Grund der reduzierten Koordinationszahl noch ausgeprägter sein. Das soll im folgenden Abschnitt untersucht werden.

3.5.3 Spektrale Eigenschaften des zweidimensionalen Hubbardmodells

Abbildung 3.13 zeigt die Spektraldichte und den Imaginärteil der Selbstenergie für das zweidimensionale Quadratgitter bei Halbfüllung. Wie schon im einfach-kubischen Gitter finden wir auch hier Zustände mit unendlich langer Lebensdauer am Γ -Punkt und am M -Punkt in der ersten Brillouinzone. Die Ursache ist wieder der verschwindende Imaginärteil der Selbstenergie in der entsprechenden Energieregion der Zustände.

Die Selbstenergie zeigt das für Fermiflüssigkeiten typische $\sim E^2$ Verhalten am Ferminiveau in einem großen Gebiet der ersten Brillouinzone. An speziellen Punkten in

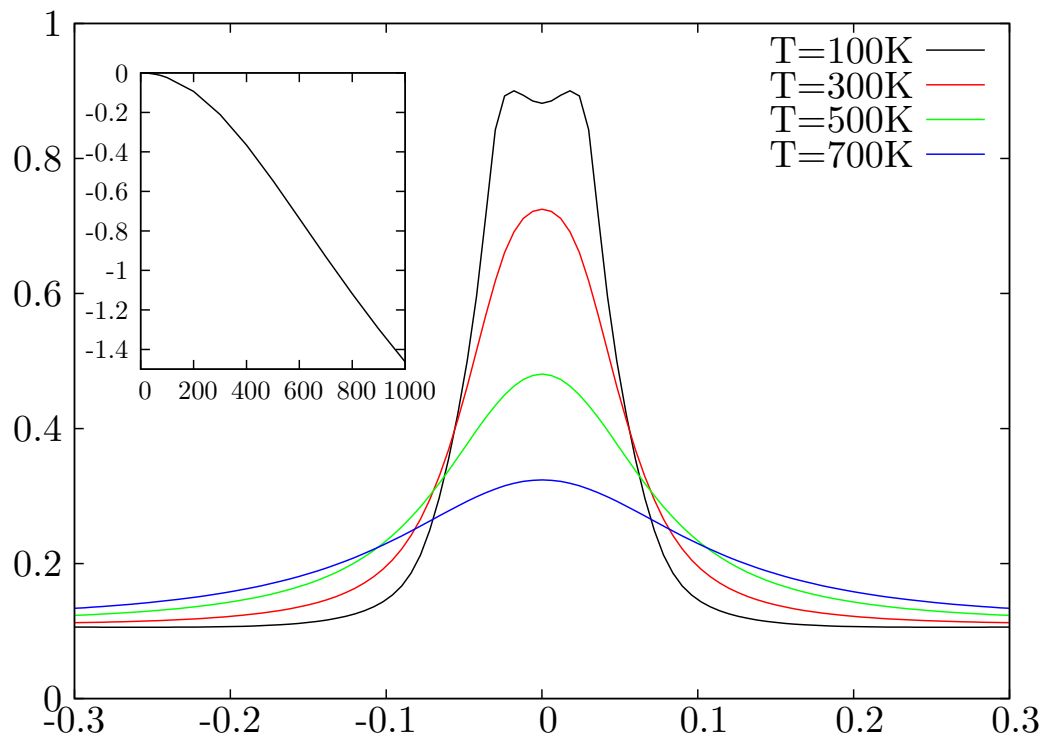


Abbildung 3.12: Die Kondoeresonanz bei verschiedenen Temperaturen T . Die eingesezte Abbildung zeigt den wellenzahlgemittelten Imaginärteil der Selbstenergie am Fermi-niveau als Funktion der Temperatur. Parameter: $n = 1$, $U = 1$ eV und $W = 1$ eV.

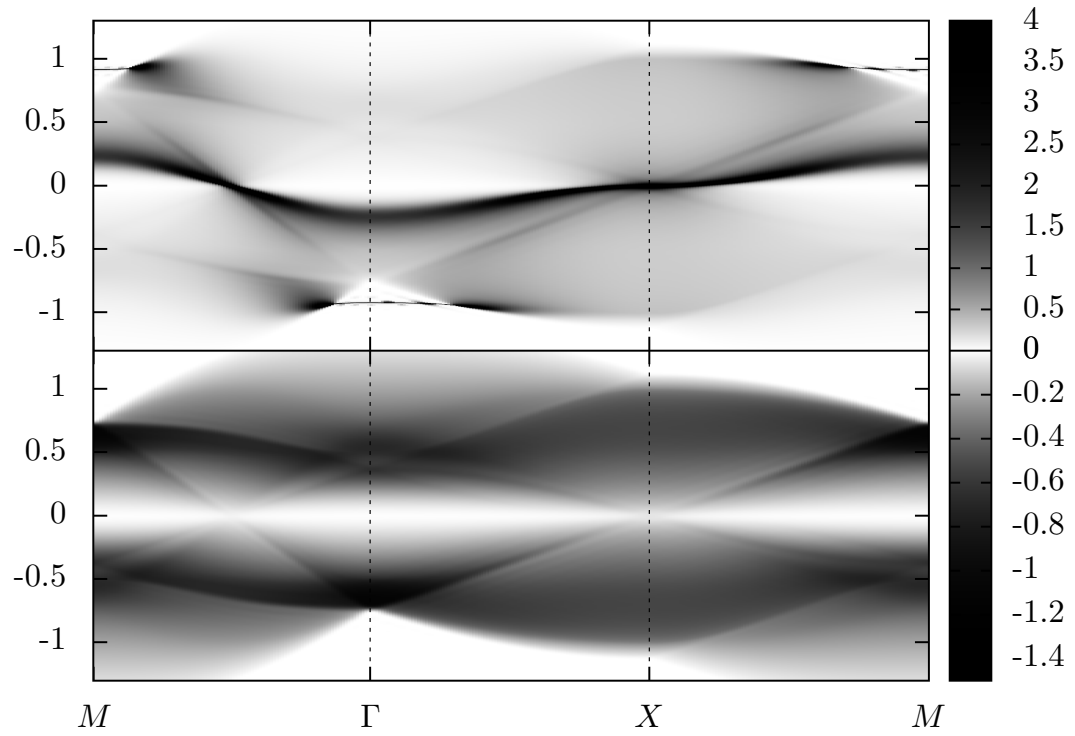


Abbildung 3.13: Spektraldichte (oben) und Imaginärteil der Selbstenergie (unten) entlang der Hochsymmetrieachsen in der ersten Brillouinzone des quadratischen Gitters: $M(\pi, \pi) \rightarrow \Gamma(0, 0) \rightarrow X(\pi, 0) \rightarrow M$. Die numerischen Werte wurden durch Graustufen kodiert und können dem Farbbalken rechts neben der jeweiligen Abbildung entnommen werden. Parameter: $n = 1$, $U = 1$ eV, $W = 1$ eV und $T = 10$ K.

der Brillouinzone, die der Fermifläche zugeordnet werden können²², treten nun aber Abweichungen vom E^2 -Verhalten der Selbstenergie auf. So zeigt die Selbstenergie am X -Punkt und bei $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, also zwischen Γ - und M -Punkt, eine lineare Energieabhängigkeit. Dieses „marginale“²³ Fermiflüssigkeitsverhalten ist die Konsequenz einer besonderen Eigenschaft der Fermifläche an diesen Punkten, die als „perfect nesting“ bezeichnet wird. Darunter versteht man, dass das Hinzuaddieren eines beliebigen reziproken Gittervektors \mathbf{Q} zum ursprünglichen Wellenvektor an der Fermifläche wieder auf einen Punkt der Fermifläche führt:

$$\epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} + \text{Re } \Sigma_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}(0) \approx \epsilon_{\mathbf{k}} + \text{Re } \Sigma_{\mathbf{k}}(0). \quad (3.138)$$

Elektronen können in diesem Fall sehr effizient streuen, da der zur Verfügung stehende Phasenraum groß ist. Beim zweidimensionalen Hubbardmodell ist die nesting-Bedingung gerade bei Halbfüllung gegeben [59, 151]. Ein zweiter Effekt dieses Mechanismus ist die Ausbildung von „Schattenbändern“. Damit sind die dunkleren Linien in der Spektraldichte gemeint, die von den speziellen Punkten X und $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ zum Γ - bzw. X -Punkt laufen, und deren Anstieg durch die Bedingung $E \approx \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ bestimmt ist. Diese Schattenbänder, die bereits in einer Arbeit von Vilk [150] erwähnt werden, sind keine echten Quasiteilchenbänder, sondern lediglich thermische Anregungen, die mit einem lokalen Minimum des Imaginärteils der Selbstenergie korrespondieren. Um das anschaulicher werden zu lassen, ist in Abbildung 3.14 die Spektraldichte (oben) und die Selbstenergie (unten) bei $\mathbf{k} = (\frac{6\pi}{20}, \frac{6\pi}{20})$ gezeigt. Die grün-gestrichelte Linie gehorcht der Bedingung $F(E) = E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}$ und ihre Schnittpunkte mit dem Realteil der Selbstenergie (schwarze Kurve) markieren die Quasiteilchenanregungen des Systems. In der Spektraldichte führt nur eine dieser Energien zur Ausbildung eines Quasiteilchenpeaks (nahe $E = 0$ eV), die anderen Anregungen sind wegen des großen Imaginärteils der Selbstenergie (rote Kurve) stark gedämpft. Die vertikale, schwarz-gepunktete Linie markiert den Energiepunkt $E = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ mit $\mathbf{Q} = (2n\pi, 2n\pi)$; $n \in \mathbb{Z}$. An dieser Stelle hat der Imaginärteil der Selbstenergie tatsächlich ein lokales Minimum und in der Spektraldichte zeigt sich das Schattenband.

Zum Abschluss dieses Abschnitts sei noch eine Bemerkung zur Numerik gestattet. In der Arbeit von Schweitzer und Czycholl [132] wurden Werte für die Anzahl der Schalen in der Summe (3.106) angegeben, die nötig sind, um konvergierte Ergebnisse für die Spektraldichte zu erhalten. Für das zweidimensionale Gitter haben die Autoren mit 19 Schalen gerechnet und im einfach-kubischen Gitter mit lediglich vier Schalen. Um die hier besprochenen Details der 2D-QDOS, insbesondere die Schattenbänder, auflösen zu können, waren aber deutlich mehr Schalenbeiträge nötig. So wurden in dieser Arbeit alle Rechnungen zum zweidimensionalen Gitter mit 201 Schalen und zum dreidimensionalen Gitter mit 61 Schalen durchgeführt, da diese Schalenanzahlen in vorhergehenden numerischen Tests zu ausreichend konvergierten Resultaten führten.

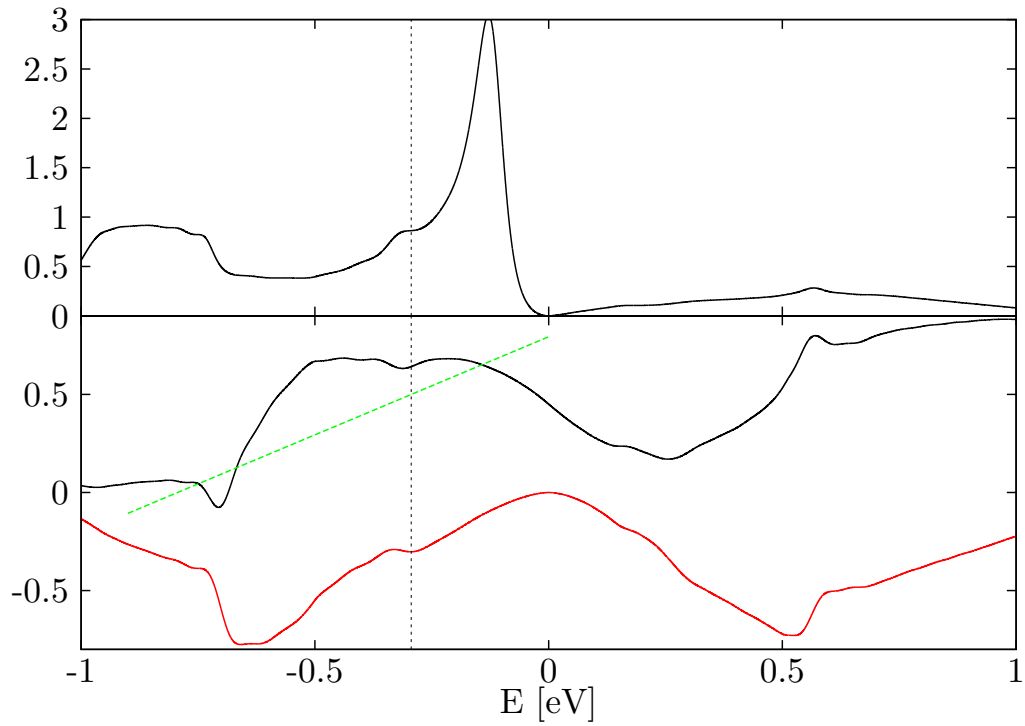


Abbildung 3.14: Spektraldichte (oben) und Selbstenergie (unten, schwarze Kurve: Realteil, rote Kurve: Imaginärteil) für das quadratische Gitter bei $\mathbf{k} = \left(\frac{6\pi}{20}, \frac{6\pi}{20}\right)$. Die vertikale, gepunktete Linie zeigt die Position des Schattenbandes. Die Schnittpunkte der grün-gestrichelten Linie mit dem Realteil der Selbstenergie markieren die Quasiteilchenenergien. Parameter: $n = 1$, $U = 1$ eV, $W = 1$ eV und $T = 10$ K.

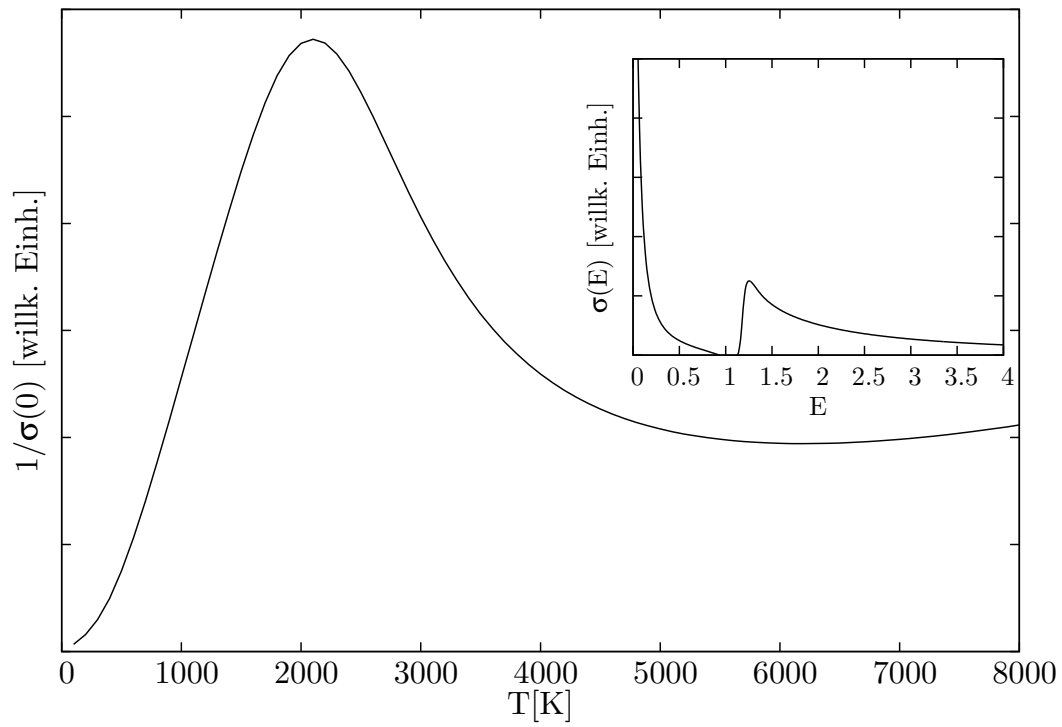


Abbildung 3.15: Korrelationsanteil des Widerstandes (inverse statische Leitfähigkeit) als Funktion der Temperatur T für das kubische Gitter. Die eingesetzte Abbildung zeigt die optische Leitfähigkeit als Funktion der Energie E . Parameter: $n = 1$, $U = 2$ eV, $W = 1$ eV. Eingesetzte Abbildung: $T = 100$ K.

3.5.4 Leitfähigkeit

Aus der Formel für den Korrelationsanteil zur optischen Leitfähigkeit (3.136) erkennt man, dass diese hauptsächlich von der Anzahl der zur Verfügung stehenden Quasiteilchenzustände bestimmt wird. Abbildung 3.15 zeigt die inverse statische ($E = 0$) Leitfähigkeit (Widerstand) bei Halbfüllung als Funktion der Temperatur. Bei niedrigen Temperaturen steigt der Widerstand quadratisch mit der Temperatur. Das kann mit der Reduktion der Zustandsdichte am Fermi-niveau, wie sie in Abbildung 3.12 gezeigt ist, erklärt werden. Der Widerstand steigt so lange, bis die thermische Energie ausreicht, um Elektronen aus dem unteren in das obere Hubbard-Band anzuregen ($k_B T \approx U$). Danach sinkt der Widerstand wieder, durchschreitet ein Minimum und steigt dann wieder langsam an.

Die eingesetzte Abbildung zeigt die optische Leitfähigkeit bei einer festen Temperatur ($T = 100$ K). Die Leitfähigkeit sinkt zunächst mit steigender Energie, da es zwischen der Kondoresonanz und dem oberen Hubbardband keine Zustände gibt. Sobald die Energie ausreicht, Elektronen vom Fermi-niveau in das obere Hubbardband anzuregen, steigt die Leitfähigkeit stark an, durchläuft ein Maximum und sinkt danach wieder ab.

Die hier gezeigten Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit DMFT-Rechnung für U unterhalb des Metall-Isolator-Übergangs [115].

3.5.5 Die inverse paramagnetische Suszeptibilität und der ferromagnetische Phasenübergang

Das Inverse der paramagnetischen Suszeptibilität (291) (IPS) kann als ein Werkzeug zum Auffinden möglicher Phasengrenzen eines ferromagnetischen Phasenübergangs im $n - U$ -Diagramm dienen. Die Nulldurchgänge der IPS stellen hierfür kritische Punkte dar. Abbildung 3.16 zeigt die IPS für das zweidimensionale (2D) und das dreidimensionale (3D) Gitter bei tiefer Temperatur ($T = 10$ K) für verschiedene U . Für das einfach-kubische Gitter finden wir Nulldurchgänge der IPS oberhalb eines kritischen Wertes $U/W \approx 15$. Für das quadratische Gitter finden wir dagegen keine Nulldurchgänge der IPS, wenn wir mit der voll wellenzahlabhängigen MPT-Selbstenergie rechnen. Dazu ist anzumerken, dass die in der oberen Abbildung gezeigte rote Kurve für $U/W = 500$ gesättigt ist in dem Sinne, dass eine weitere Erhöhung von U die Form der IPS nicht mehr groß ändert.

Benutzt man hingegen die lokale Version der MPT, so findet man auch für den 2D-Fall Nulldurchgänge und damit einen ferromagnetischen Phasenübergang.

Hiermit haben wir eines der Hauptergebnisse dieser Arbeit gefunden. Die Aussagen der nichtlokalen Theorie bezüglich eines ferromagnetischen Phasenübergangs sind in Übereinstimmung mit dem Mermin-Wagner-Theorem und die Nichtlokalität der Selbstenergie ist hierfür eine wesentliche Voraussetzung. Dagegen liefert eine DMFT-Rechnung mit lokaler Selbstenergie auch für das quadratische Gitter Ferromagnetismus [109].

Wir kommen jetzt zur Diskussion der magnetischen Eigenschaften des 3D-Systems.

²²Zur Fermifläche gehören die Punkte im \mathbf{k} -Raum, an denen die deutlich sichtbare Dispersion des Kondopeaks das Fermi-niveau bei $E = 0$ eV schneidet.

²³In der englischen Originalliteratur wird eine lineare Energieabhängigkeit der Selbstenergie als „marginal Fermi liquid behavior“ bezeichnet.

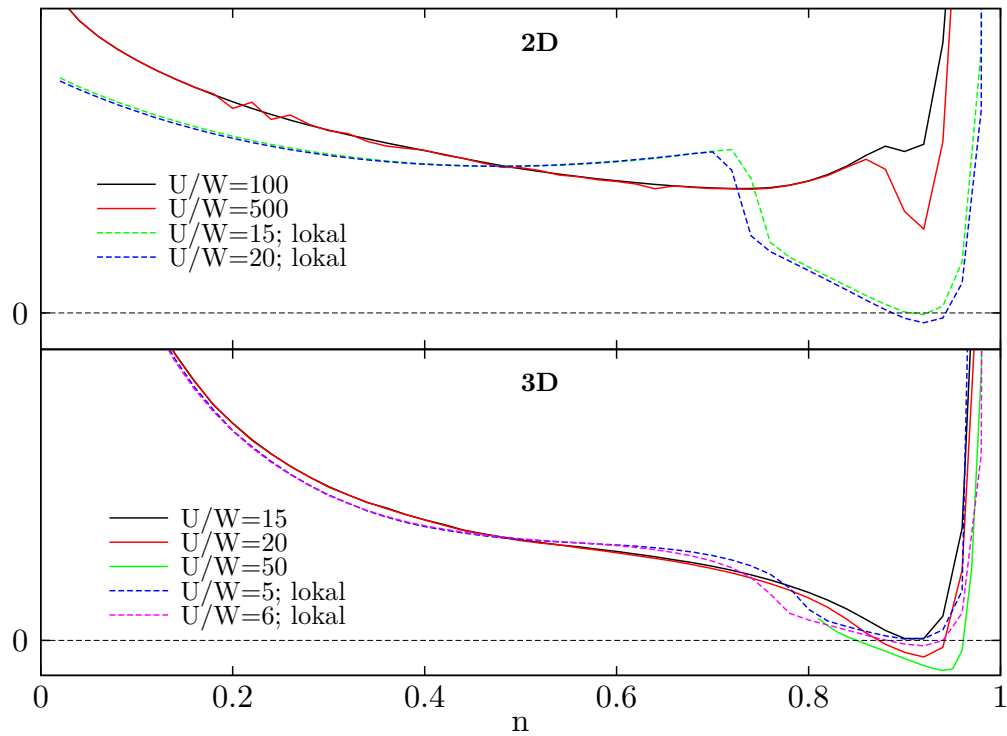


Abbildung 3.16: Die inverse paramagnetische Suszeptibilität als Funktion der Bandfüllung n für verschiedene Werte der Coulombabstoßung U/W . Die durchgezogenen Linien zeigen die Ergebnisse der voll wellenzahlabhängigen MPT-Rechnungen und die gestrichelten Linien die Ergebnisse der lokalen MPT. Parameter: $T = 10$ K.

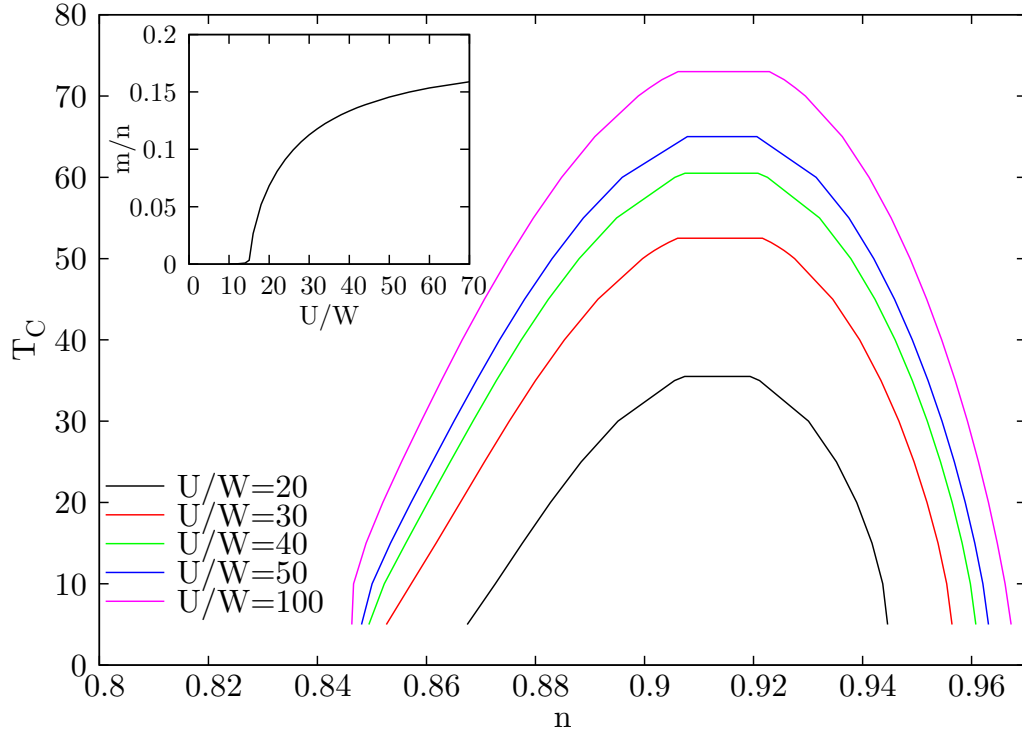


Abbildung 3.17: Die Curietemperatur T_C als Funktion der Bandfüllung n für verschiedene U/W . Die eingesetzte Abbildung zeigt die relative Magnetisierung $|n_\uparrow - n_\downarrow|/n$ als Funktion der Wechselwirkung U/W . Parameter: $n = 0.9$ und $T = 10$ K.

Das recht hohe kritische U widerspiegelt, dass das einfach-kubische Gitter insgesamt nicht besonders günstig für Ferromagnetismus ist, da die antiferromagnetischen Tendenzen, die mit dem Ferromagnetismus konkurrieren, in diesem Gittertyp nicht durch Frustration unterdrückt werden [152]. Die IPS hat zwei Nulldurchgänge, die die untere und obere Grenze der ferromagnetischen Phase markieren. Die Curietemperaturen T_C für verschiedene Werte U/W als Funktion der Bandfüllung n sind in Abbildung 3.17 gezeigt. Das maximale T_C findet man bei einer Bandfüllung von $n \approx 0.91$. Beginnend beim kritischen $U_c/W \approx 15$ steigt T_C mit steigendem U zunächst schnell an, das Anwachsen von T_C verlangsamt sich aber dann zusehends. Dasselbe gilt für die Magnetisierung $m = |n_\uparrow - n_\downarrow|$ und für die Phasengrenze. Die relative Magnetisierung ist in der eingesetzten Abbildung in 3.17 für $n = 0.9$ und $T = 10$ K gezeigt. Das elektronische System ist fern von einer vollständigen Polarisation. Für $U/W = 70$ beträgt die Polarisation gerade $\sim 16\%$ und steigt nur noch langsam mit weiter steigendem U . Ein damit in Einklang stehendes Ergebnis wurde von H. Park et. al. mit einer DMFT-Rechnung erzielt [109]. In ihrer Rechnung konnten die Autoren selbst im Grenzfall $U \rightarrow \infty$ keine Sättigung der Magnetisierung für ein Gitter mit Nächste-Nachbar-Hopping erreichen.

Das ferromagnetische Phasendiagramm des 3D-Hubbardmodells ist in Abbildung 3.18 dargestellt. Die untere Phasengrenze nimmt mit steigendem U/W zunächst ab. Ihren kleinsten Wert erreicht sie bei $U/W \approx 350$ mit $n \approx 0.845$. Eine weitere

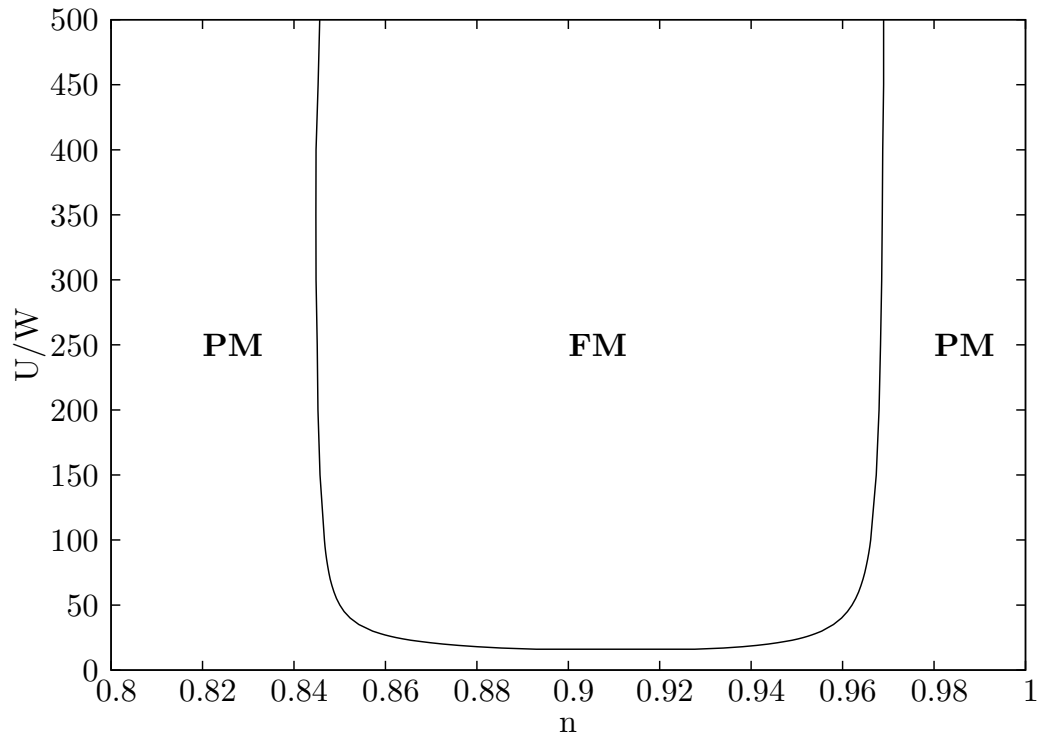


Abbildung 3.18: Ferromagnetisches Phasendiagramm des einfach-kubischen Gitters in der $n - U$ -Ebene. Parameter: $T = 10$ K.

Erhöhung von U/W führt dann wieder zu einer leicht ansteigenden Phasengrenze. Dagegen wächst die obere Phasengrenze monoton mit U/W und erreicht einen Wert von $n \approx 0.969$ bei $U/W = 500$. Dieses Resultat ist in Einklang mit Nagaokas Theorem.

Die lokale Version der MPT liefert wie zu erwarten, ein niedrigeres kritisches $U_k/W \approx 5$ (bei $T = 10$ K) für Ferromagnetismus. Dies ist in guter Übereinstimmung mit Resultaten aus DMFT-Rechnungen ($U/W \gtrsim 3$) [129].

Allgemeine mathematische Beziehungen

1 Fouriertransformationen

1.1 Zeit-/Energiedarstellung

Für den Wechsel zwischen Energie- und Zeitdarstellung wird in dieser Arbeit die nicht-symmetrische Fouriertransformation:

$$F(E) = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') F(t-t') e^{iE(t-t')}, \quad (139)$$

$$F(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE F(E) e^{-iE(t-t')} \quad (140)$$

verwendet.

1.2 Elektronische Operatoren

Die elektronischen Erzeuger- und Vernichtoperatoren werden nach der folgenden Vorschrift transformiert:

$$c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{l\sigma}, \quad c_{l\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (141)$$

$$c_{\mathbf{k}\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{l\sigma}^+, \quad c_{l\sigma}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{\mathbf{k}\sigma}^+. \quad (142)$$

1.3 Spinoperatoren

Die Spinoperatoren werden wie folgt transformiert:

$$S_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} S_l^{\alpha}, \quad S_l^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} S_{\mathbf{k}}^{\alpha}, \quad (143)$$

wobei α für $\alpha = z, +, -$ steht.

2 Kommutatoren/Antikommutatoren

2.1 Spinoperatoren

Die Spinoperatoren erfüllen die folgenden Kommutatorrelationen:

$$[S_l^z, S_m^\sigma]_- = z_\sigma \delta_{lm} S_l^\sigma, \quad (144)$$

$$[S_l^\sigma, S_m^{-\sigma}]_- = 2z_\sigma \delta_{lm} S_l^z. \quad (145)$$

Unter Berücksichtigung von (143) ergibt sich daraus für die fouriertransformierten Spinoperatoren:

$$[S_{\mathbf{k}_1}^z, S_{\mathbf{k}_2}^\sigma]_- = \frac{1}{\sqrt{N}} z_\sigma S_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2}^\sigma, \quad (146)$$

$$[S_{\mathbf{k}_1}^\sigma, S_{\mathbf{k}_2}^{-\sigma}]_- = \frac{1}{\sqrt{N}} 2z_\sigma S_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2}^z. \quad (147)$$

2.2 Die Lie'sche Entwicklungsformel

Die Lie'sche Entwicklungsformel stellt eine nützliche Beziehung zur Berechnung unitärer Transformationen von Operatoren dar. Sie lautet:

$$e^X Y e^{-X} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} [X, Y]_m \quad (148)$$

mit $[X, Y]_m = [X, [X, Y]_{m-1}]$ und $[X, Y]_0 = Y$.

Greenfunktionen

3 Definitionen

Die zweizeitige, retardierte Greenfunktion der Vielteilchen-Theorie ist definiert als [100]:

$$G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle^{\text{ret}} = -i\Theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{-\epsilon} \rangle. \quad (149)$$

Die letzte eckige Klammer bedeutet, dass der thermodynamische Erwartungswert des Kommutators ($\epsilon = 1$) bzw. Antikommutators ($\epsilon = -1$) im großkanonischen Ensemble zu bilden ist. Die zeitabhängigen der Operatoren $A(t), B(t')$ sind Operatoren im Heisenbergbild.

Eine verwandte Größe stellt die Spektraldichte dar:

$$S_{AB}^{(\epsilon)}(t, t') = \frac{1}{2\pi} \langle [A(t), B(t')]_{-\epsilon} \rangle. \quad (150)$$

Diese hat eine enge Beziehung zum Experiment und kann zum Beispiel genutzt werden, um die Linienform eines Photoemissionsexperiments zu berechnen. Wie man sich leicht an der Definition der Spektraldichte klarmacht (zyklische Invarianz der Spur), ist diese eigentlich nur von der Differenz der beiden Zeiten t, t' abhängig. Sie kann somit durch eine Fouriertransformation diagonalisiert werden:

$$S_{AB}^{(\epsilon)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dt(t - t') S_{AB}^{(\epsilon)}(t - t') e^{iE(t-t')}. \quad (151)$$

Aus der Spektraldichte lässt sich eine verallgemeinerte Greenfunktion berechnen (Spektraldarstellung der Greenfunktion):

$$G_{AB}^{(\epsilon)}(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{S_{AB}^{(\epsilon)}(E')}{E - E'}, \quad (152)$$

wobei E einen beliebigen Wert in der komplexen Ebene annehmen kann (mit Ausnahme der singulären Punkte des Anregungsspektrums auf der reellen Achse). Aus dieser erhält man durch die Grenzwertbildung $E \rightarrow E_{\mathbb{R}} + i0^+$ ($E_{\mathbb{R}}$ reell) die Fouriertransformierte der retardierten Greenfunktion (149). Umgekehrt lässt sich bei Kenntnis der Greenfunktion die Spektraldichte berechnen (E reell):

$$S_{AB}^{(\epsilon)}(E) = \frac{-1}{2\pi i} \left(G_{AB}^{(\epsilon)}(E + i0^+) - G_{AB}^{(\epsilon)}(E - i0^+) \right), \quad (153)$$

wobei wir die Diracidentität:

$$\frac{1}{x - x_0 \pm i0^+} = \text{CH} \frac{1}{x - x_0} \mp i\pi\delta(x - x_0) \quad (154)$$

ausgenutzt haben. Diese gilt natürlich nur unter dem Integral und CH steht für den Cauchyschen Hauptwert des Integrals.

4 Die Greenfunktion freier Elektronen

Wir betrachten den Hamiltonoperator freier Elektronen in einem gitterperiodischen Kristall:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (155)$$

Dieser kann durch Fouriertransformation diagonalisiert werden, da die Hoppingintegrale t_{ij} nur vom Abstand der Gittervektoren \mathbf{R}_i und \mathbf{R}_j abhängen. Bezeichnet $\epsilon_{\mathbf{k}}$ die freie Dispersion der Elektronen (Fouriertransformierte der Hoppingintegrale), so erhält man nach einfacher Rechnung:

$$G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}} + i0^+} \quad (156)$$

für die freie Greenfunktion in der Wellenzahldarstellung. Die häufig benötigte, lokale freie Greenfunktion ergibt sich daraus durch Summation über alle Wellenzahlen:

$$G_{ii}^{(0)}(E) = G^{(0)}(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E). \quad (157)$$

4.1 Analytische Fortsetzung der freien (lokalen) Greenfunktion

Die verallgemeinerte²⁴ freie Greenfunktion eines d -dimensionalen Gitters

$$G^{(0)}(z) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\text{1.BZ}} d^d k \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}}} \quad (158)$$

ist eine in der gesamten komplexen Ebene analytische Funktion, mit Ausnahme eines Bereichs auf der reellen Achse, auf der sie eine Schnittlinie oder auch einzeln liegende Polstellen besitzt. Bei den im folgenden betrachteten Dispersionsrelationen $\epsilon_{\mathbf{k}}$ handelt es sich um solche, die ein zusammenhängendes, auf einen endlichen Bereich beschränktes Spektrum besitzen. Überschreitet man die reelle Achse, aus der oberen komplexen Halbebene kommend, in dem Bereich, der durch die Werte von $\epsilon_{\mathbf{k}}$ gegeben ist, so macht der Imaginärteil von $G^{(0)}(z)$ einen Sprung: $\Delta(x) = 2\pi\rho(x)$, wobei $\rho(x)$ die freie Zustandsdichte an der Stelle x (auf der reellen Achse) bezeichnet. Der Realteil verhält sich dagegen stetig, ist aber nicht stetig differenzierbar. Wir suchen nun nach einer analytischen Fortsetzung der Greenfunktion aus der oberen in die untere komplexe Halbebene. Außerhalb des kontinuierlichen Spektrums ($\rho(x) = 0$) zeigt die Greenfunktion von sich ein analytisches Verhalten an der reellen Achse. Im Bereich des Spektrums ($\rho(x) \neq 0$) zeigt der Hauptzweig der Greenfunktion beim Überqueren der reellen Achse die schon weiter oben beschriebene Unstetigkeit und eine mögliche analytische Fortsetzung führt zwangsläufig auf ein neues Blatt der Riemannfläche. Besitzt $\rho(x)$ zusätzliche (Van Hove)-Singularitäten innerhalb des kontinuierlichen

²⁴ „Verallgemeinert“ bedeutet in diesem Kontext, dass die Definition auf die gesamte komplexe Ebene ausgedehnt wird.

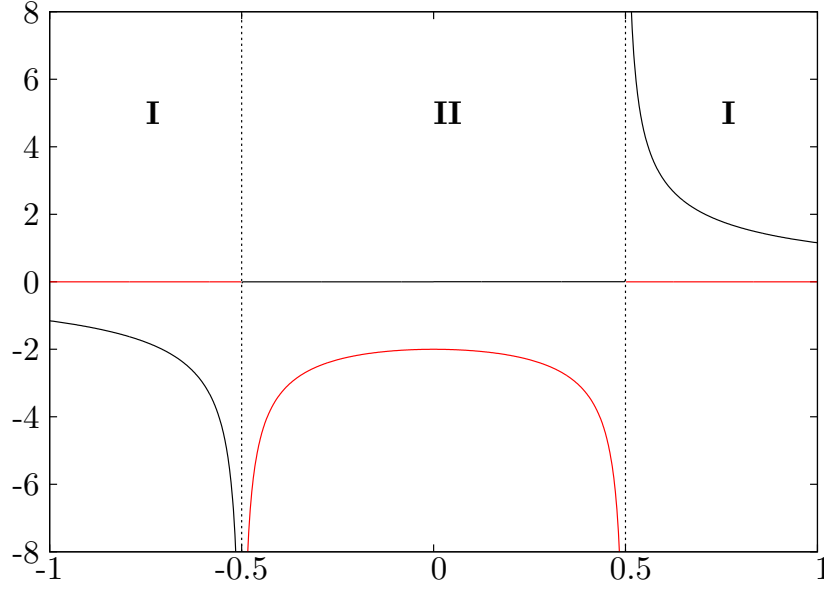


Abbildung 19: Freie Greenfunktion der linearen Kette unmittelbar oberhalb der reellen Achse. Schwarz: Realteil, rot: Imaginärteil. Die gestrichelte, vertikale Linie markiert die Position der Van Hove-Singularitäten. Parameter: $W = 1.0$ eV.

Spektrums, so können sogar mehrere neue Blätter notwendig sein, um eine vollständige Fortsetzung zu erreichen. Wir werden jetzt die analytische Fortsetzung für die Greenfunktionen von Gittern mit einer Tight-Binding-Dispersion in ein, zwei und drei Dimensionen diskutieren.

Die lineare Kette

Die Tight-Binding-Dispersion der linearen Kette lautet

$$\epsilon_{k_x} = -\frac{W}{2} \cos(k_x). \quad (159)$$

Setzen wir dies in (158) ein, so ergibt sich nach einfacher Rechnung, die z.B. in [27] zu finden ist,

$$G_{d=1}^{(0)}(z) = \frac{\text{sgn}(\text{Re}(z))}{\sqrt{(z - \frac{W}{2})(z + \frac{W}{2})}} \quad (160)$$

für die freie Greenfunktion. In Abbildung 19 sind der Realteil (schwarze Linie) und der Imaginärteil (rote Linie) der Greenfunktion minimal oberhalb der reellen Achse gezeigt, wobei eine Bandbreite $W = 1$ gewählt wurde. $G_{d=1}^{(0)}(z)$ besitzt Verzweigungspunkte bei $x = \pm 0.5$. Um die analytische Fortsetzung von der oberen in die untere Halbebene im Bereich **II** zu finden, ist es notwendig, die analytischen Eigenschaften der $G_{d=1}^{(0)}(z)$ konstituierenden Funktionen zu kennen. Die Wurzelfunktion \sqrt{z} hat Verzweigungspunkte erster Ordnung bei $z = 0$ und $z = -\infty$, verbunden durch eine Schnittlinie auf der negativen reellen Achse. Überschreitet man diese Linie, so muss

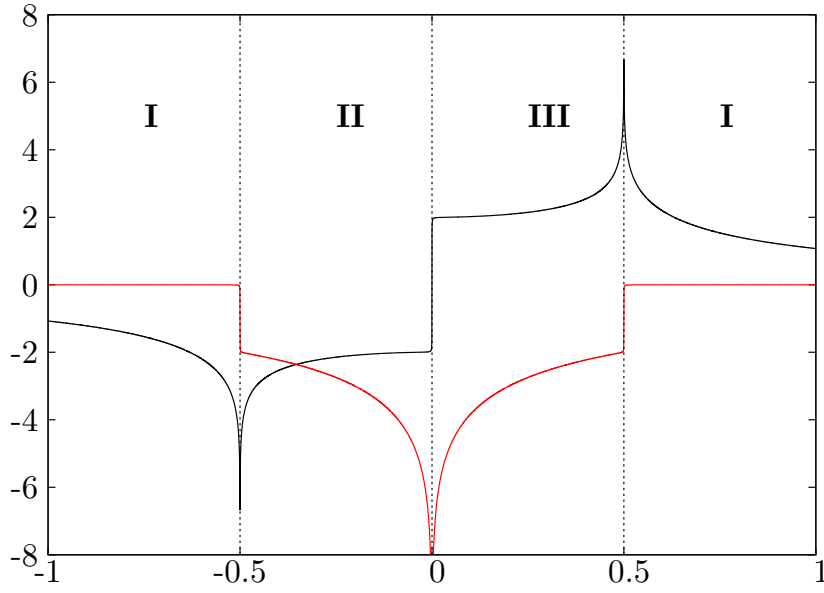


Abbildung 20: Freie Greenfunktion des quadratischen Gitters unmittelbar oberhalb der reellen Achse. Schwarz: Realteil, rot: Imaginärteil. Die gestrichelte, vertikale Linie markiert die Position der Van Hove-Singularitäten. Parameter: $W = 1.0$ eV.

man zum negativen Wert der Wurzelfunktion übergehen, um eine analytische Fortsetzung zu erreichen. Daraus ergibt sich als analytische Fortsetzung im Bereich **II**:

$$G_{d=1,\text{II}}^{(0)}(z) = -\frac{\text{sgn}(\text{Re}(z))}{\sqrt{(z - \frac{W}{2})(z + \frac{W}{2})}}. \quad (161)$$

Das quadratische Gitter

Die Tight-Binding-Dispersion eines quadratischen Gitters ist gegeben durch

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\frac{W}{4}(\cos(k_x) + \cos(k_y)). \quad (162)$$

Daraus ergibt sich die folgende freie Greenfunktion [27]:

$$G_{d=2}^{(0)}(z) = \frac{2}{z\pi} K\left(\frac{W}{2z}\right), \quad (163)$$

wobei $K(z)$ das vollständige elliptische Integral erster Art bezeichnet. Abbildung 20 zeigt den Real- und Imaginärteil dieser Funktion wiederum unmittelbar oberhalb der reellen Achse. Man erkennt, dass die Greenfunktion neben den Randsingularitäten bei $x = \pm 0.5$ eine weitere Van Hove-Singularität bei $x = 0$ besitzt. Die analytische Fortsetzung über die reelle Achse wird darum links und rechts des Punktes $x = 0$ eine unterschiedliche Gestalt haben, da keine analytische Fortsetzung über einen singulären Punkt möglich ist. Die Van Hove-Singularitäten im inneren des kontinuierlichen Spektrums sorgen also, mit anderen Worten, für zusätzliche Verzweigungspunkte

der Greenfunktion auf der Riemannfläche. Um die analytische Fortsetzung zu bestimmen, diskutieren wir zunächst die analytischen Eigenschaften von $K(z)$. Die Funktion $K(z)$ hat Verzweigungspunkte zweiter Ordnung bei $z = \pm 1$. Sie ist analytisch in der gesamten Riemannfläche mit Ausnahme der Schnittlinien auf der reellen Achse, die $z = 1$ mit $z = \infty$ und $z = -1$ mit $z = -\infty$ verbinden. Die analytische Fortsetzung über diese Schnittlinien wurde in [92] abgeleitet. Überschreitet man die Schnittlinie auf der positiven reellen Achse, aus der oberen komplexen Halbebene kommend, oder die Schnittlinie auf der negativen reellen Achse, aus der unteren komplexen Halbebene kommend, so ergibt sich für die analytische Fortsetzung auf das zweite Riemannblatt:

$$K_2(z) = K(z) + 2iK(\sqrt{1-z^2}). \quad (164)$$

Für die Fortsetzung über die positive Schnittlinie von der unteren in die obere Halbebene und über die negative Schnittlinie aus der oberen in die untere Halbebene ergibt sich:

$$K_3(z) = K(z) - 2iK(\sqrt{1-z^2}). \quad (165)$$

Damit können wir nun die analytische Fortsetzung der Greenschfunktion aus der oberen in die untere Halbebene angeben. Im Bereich **II** ergibt sich:

$$G_{d=2,\text{II}}^{(0)}(z) = \frac{2}{z\pi} K_2\left(\frac{W}{2z}\right). \quad (166)$$

Im Bereich **III** findet man:

$$G_{d=2,\text{III}}^{(0)}(z) = \frac{2}{z\pi} K_3\left(\frac{W}{2z}\right). \quad (167)$$

Das einfach-kubische Gitter

Die Tight-Binding-Dispersion des einfach-kubischen Gitters lautet

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -\frac{W}{6}(\cos(k_x) + \cos(k_y) + \cos(k_z)). \quad (168)$$

Nach Joyce [66] ist dann die freie Greenfunktion gegeben durch:

$$G_{d=3}^{(0)}(z) = \frac{6}{W} C_1\left(\frac{6z}{W}\right) \left[{}_2F_1\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}; 1; \eta_1\left(\frac{6z}{W}\right)\right) \right]^2 \quad (169)$$

mit:

$$C_1(z) = \frac{1}{2z} \left(3\sqrt{1 - \frac{1}{z^2}} - \sqrt{1 - \frac{9}{z^2}} \right), \quad (170)$$

$$\eta_1(z) = \frac{1}{2} + \frac{1}{8z^2} \left[(9 - 4z^2)\sqrt{1 - \frac{9}{z^2}} - 27\sqrt{1 - \frac{1}{z^2}} \right], \quad (171)$$

wobei ${}_2F_1(a, b; c; z)$ die Gauß'sche hypergeometrische Funktion bezeichnet. Abbildung 21 zeigt den Real- und Imaginärteil der Greenfunktion knapp oberhalb der reellen Achse. Es ist zu erkennen, dass es im dreidimensionalen Fall drei Bereiche mit unter-

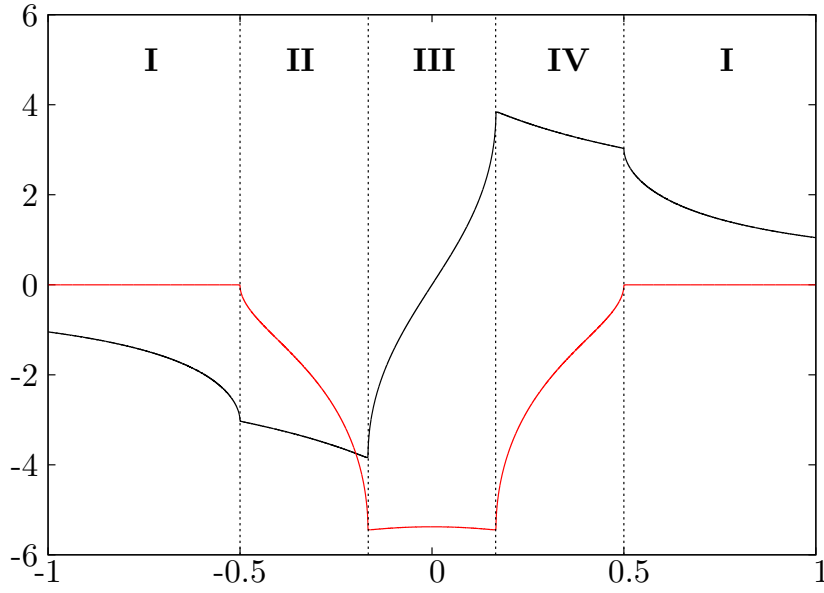


Abbildung 21: Freie Greenfunktion des einfach-kubischen Gitters unmittelbar oberhalb der reellen Achse. Schwarz: Realteil, rot: Imaginärteil. Die gestrichelte, vertikale Linie markiert die Position der Van Hove-Singularitäten. Parameter: $W = 1.0$ eV.

schiedlicher analytischer Fortsetzung gibt. Um diese zu finden, schauen wir wieder auf die Eigenschaften der $G_{d=3}^{(0)}(z)$ konstituierenden Funktionen. Die Wurzelfunktion wurde bereits weiter oben besprochen. Die hypergeometrische Funktion ist eindeutig und analytisch für Argumente $|z| < 1$. Sie besitzt einen Verzweigungspunkt 2. Ordnung bei $z = 1$ und $z = \infty$, verbunden durch eine Schnittlinie auf der positiven reellen Achse. Bezeichnen wir mit $\text{Hyp1}(z) = {}_2F_1\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}; 1; z\right)$ den Hauptwert der benötigten Funktion, so findet man mit Hilfe der in [1] gegebenen Zusammenhänge die analytische Fortsetzung über die Schnittlinie hinweg:

- aus der positiven imaginären Halbebene kommend:

$$\begin{aligned} \text{Hyp2}(z) = & (-z)^{-\frac{1}{3}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) e^{-i\frac{4\pi}{3}}}{\left(\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)\right)^2} {}_2F_1\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}; \frac{2}{3}; \frac{1}{z}\right) \\ & + (-z)^{-\frac{2}{3}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{3}\right) e^{-i\frac{8\pi}{3}}}{\left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)\right)^2} {}_2F_1\left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}; \frac{4}{3}; \frac{1}{z}\right), \end{aligned} \quad (172)$$

- aus der negativen imaginären Halbebene kommend:

$$\begin{aligned} \text{Hyp3}(z) = & (-z)^{-\frac{1}{3}} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{3}\right) e^{-i\frac{2\pi}{3}}}{\left(\Gamma\left(\frac{2}{3}\right)\right)^2} {}_2F_1\left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}; \frac{2}{3}; \frac{1}{z}\right) \\ & + (-z)^{-\frac{2}{3}} \frac{\Gamma\left(-\frac{1}{3}\right) e^{-i\frac{4\pi}{3}}}{\left(\Gamma\left(\frac{1}{3}\right)\right)^2} {}_2F_1\left(\frac{2}{3}, \frac{2}{3}; \frac{4}{3}; \frac{1}{z}\right). \end{aligned} \quad (173)$$

Betrachten wir exemplarisch die Fortsetzung im Bereich II ($-\frac{1}{2} \leq x < -\frac{1}{6}$). Überschreiten wir in diesem Bereich die reelle Achse, aus der positiven komplexen Halbebene kommend, so überqueren wir gleichzeitig die Schnittlinie der Wurzelfunktion $\sqrt{1 + \frac{3}{x}}$, die in den Funktionen $C_1(x), \eta_1(x)$ (170,171) erscheint. Diese Wurzelfunktion muss also durch ihr Pendant auf dem zweiten Blatt der Wurzelfunktion ersetzt werden, um eine analytische Fortsetzung zu erreichen, d.h. sie ändert ihr Vorzeichen. Damit finden wir als analytische Fortsetzung in die negative komplexe Halbebene:

$$C_2(x) = \frac{1}{2x} \left(3\sqrt{1 - \frac{1}{x^2}} + \sqrt{1 - \frac{9}{x^2}} \right), \quad (174)$$

$$\eta_2(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{8x^2} \left[(9 - 4x^2)\sqrt{1 - \frac{9}{x^2}} + 27\sqrt{1 - \frac{1}{x^2}} \right]. \quad (175)$$

Diese Fortsetzung gilt noch nicht allgemein, da die Funktion $\eta_2(x)$ für rein negativ imaginäre Argumente reelle Werte zwischen 1 und unendlich annimmt. In diesem Bereich liegt aber gerade die Schnittlinie der hypergeometrischen Funktion. Überschreiten wir also die negative imaginäre Achse, so müssen wir die hypergeometrische Funktion $\text{Hyp1}(z)$ durch ihre Fortsetzung $\text{Hyp2}(z)$ ersetzen. In den anderen Bereichen (III, IV) findet man ähnliche Fortsetzungen, die in der Abbildung 22 zusammengefasst dargestellt sind. Die fehlenden Definitionen lauten:

$$C_3(x) = -\frac{1}{2x} \left(3\sqrt{1 - \frac{1}{x^2}} - \sqrt{1 - \frac{9}{x^2}} \right), \quad (176)$$

$$\eta_3(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{8x^2} \left[(9 - 4x^2)\sqrt{1 - \frac{9}{x^2}} - 27\sqrt{1 - \frac{1}{x^2}} \right]. \quad (177)$$

5 Bewegungsgleichung und Selbstenergie

Aus der Definition der retardierten Greenfunktion (149) lässt sich durch Ableitung nach der Zeit eine Bewegungsgleichung gewinnen ($\hbar = 1$):

$$i\partial_t G_{AB}^{\text{ret}}(t, t') = \delta(t - t') \langle [A, B]_{-\epsilon} \rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]_{-}(t); B(t') \rangle\rangle. \quad (178)$$

Mit Hilfe der Fouriertransformation (139) kann diese Differentialgleichung in eine algebraische Gleichung im Energieraum umgewandelt werden:

$$EG_{AB}^{\text{ret}}(E) = \langle [A, B]_{-\epsilon} \rangle + \langle\langle [A, \mathcal{H}]_{-}; B \rangle\rangle_E. \quad (179)$$

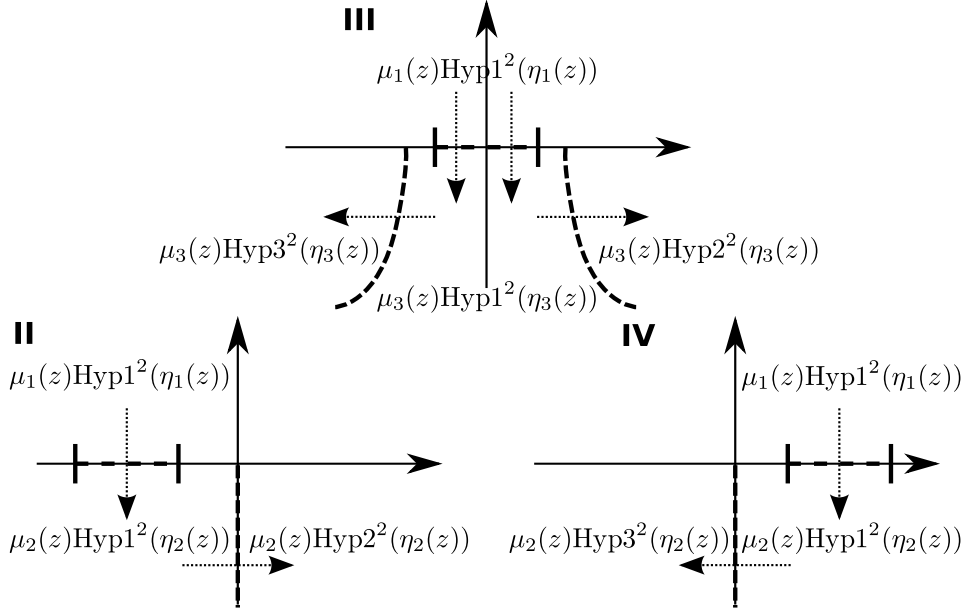


Abbildung 22: Analytische Fortsetzungen der freien Greenfunktion des einfach-kubischen Gitters.

Bisher haben wir die Operatoren A, B nicht näher spezifiziert. In dieser Arbeit untersuchen wir gitterperiodische Systeme, die sich durch einen Hamiltonoperator der Form:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{WW}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{n}_{\mathbf{k}\sigma} + \mathcal{H}_{\text{WW}} \quad (180)$$

beschreiben lassen. Für diese Systeme ist man häufig an der Ein-Elektronen-Greenfunktion

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; c_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle \quad (181)$$

interessiert, aus der sich eine Vielzahl von experimentell relevanten Größen berechnen läßt [103]. Der Wechselwirkungsanteil des Hamiltonoperators \mathcal{H}_{WW} verhindert dann im Allgemeinen, dass sich die Bewegungsgleichungshierarchie auf irgendeiner Stufe schließt und man ist auf Approximationen angewiesen. Eine formale Lösung gelingt aber durch die Einführung einer (im Allgemeinen energie- und wellenzahlabhängigen) Selbstenergie:

$$[c_{\mathbf{k}\sigma}, \mathcal{H}_{\text{WW}}]_- \rightarrow \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (182)$$

mit der sich die Ein-Elektronen-Greenfunktion als:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{E - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)} \quad (183)$$

darstellen läßt.

6 Spektralmomente

Die Momente der Ein-Elektron-Spektraldichte $S_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ sind wie folgt definiert:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)} = \int_{-\infty}^{\infty} dE E^n S_{\mathbf{k}\sigma}(E). \quad (184)$$

Sie können alternativ nach der algebraischen Vorschrift [100]:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)} = \left\langle \underbrace{[[[\dots [c_{\mathbf{k}\sigma}, \mathcal{H}]_-, \dots, \mathcal{H}]_-, c_{\mathbf{k}\sigma}^+]_+]}_{n\text{-fach}} \right\rangle \quad (185)$$

berechnet werden.

Die Spektralmomente sind die Koeffizienten der Hochenergieentwicklung der Greenfunktion:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \frac{1}{E} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{M_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)}}{E^n}, \quad (186)$$

wie sich an (152) unmittelbar durch Reihenentwicklung ablesen lässt. Andererseits gilt auch die Dysongleichung:

$$(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}})G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = 1 + \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)G_{\mathbf{k}\sigma}(E), \quad (187)$$

die sich aus (183) ableiten lässt. Aus dieser folgt, dass sich auch die Selbstenergie eine Hochenergieentwicklung besitzt:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(n)}}{E^n}. \quad (188)$$

Zwischen den Koeffizienten niedriger Ordnung bestehen die Beziehungen:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = 1, \quad (189a)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)}, \quad (189b)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} \right)^2 + C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}, \quad (189c)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)} = \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} \right)^3 + 2 \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} \right) C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} + C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} \quad (189d)$$

und

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu, \quad (190a)$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} - (M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^2, \quad (190b)$$

$$C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)} - 2M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} + (M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^3. \quad (190c)$$

Nachträge zu einzelnen Kapiteln

7 Zum magnetischen Polaron

7.1 Bewegungsgleichung der Greenfunktion

Die Bewegungsgleichung der elektronischen Greenfunktion des Kondogittermodells, dessen Hamiltonoperator im (2.1) gegeben ist, lautet

$$\sum_l ((E + \mu)\delta_{l,i} - T_{il}) \langle\langle c_{l\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle = \delta_{ij} - \frac{J}{2} \left(z_\sigma \langle\langle S_i^z c_{i\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle + \langle\langle S_i^{-\sigma} c_{i-\sigma}; c_{j\sigma}^+ \rangle\rangle \right) \quad (191)$$

Die auf der rechten Seite auftauchenden, höheren Greenfunktionen werden als Ising- und Spinflip-Greenfunktion bezeichnet.

7.2 Spektralmomente

Für den Spezialfall des magnetischen Polarons ist die Mittelung in der Rechenvorschrift der Spektralmomente (185) mit dem Hilbertraum-Zustand des Elektronen- und Magnonenvakuums durchzuführen. Mit der Definition:

$$P_n = \underbrace{[[\dots [c_{\mathbf{k}\downarrow}, \mathcal{H}]_-, \mathcal{H}]_-, \dots, \mathcal{H}]_-}_{n\text{-fach}} \quad (192)$$

können wir schreiben:

$$M_{\mathbf{k},\downarrow}^{(n)} = \langle 0, 0 | [P_n, c_{\mathbf{k}\downarrow}^+] | 0, 0 \rangle = \langle 0, 0 | P_n c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ | 0, 0 \rangle = \langle 0, 0 | [P_{n-1}, \mathcal{H}]_- c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ | 0, 0 \rangle \quad (193)$$

$$= \langle 0, 0 | P_{n-1} \mathcal{H} c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ | 0, 0 \rangle = \langle 0, 0 | c_{\mathbf{k}\downarrow} \mathcal{H}^n c_{\mathbf{k}\downarrow}^+ | 0, 0 \rangle. \quad (194)$$

Damit ergibt sich:

$$M_{\mathbf{k},\downarrow}^{(n)} = i^n \frac{\partial^n}{\partial t^n} \langle \mathbf{k} \downarrow, 0 | e^{-i\mathcal{H}t} | \mathbf{k} \downarrow, 0 \rangle \Big|_{t=0}. \quad (195)$$

Das Matrixelement des Zeitentwicklungsoperators, gebildet mit dem Down-Elektron-Zustand zur Wellenzahl \mathbf{k} , ist die erzeugende Funktion der Down-Elektron-Spektralmomente

zur selben Wellenzahl. Die ersten vier Spektralmomente ergeben sich zu:

$$M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(0)} = 1, \quad (196)$$

$$M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(1)} = \epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2}, \quad (197)$$

$$M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(2)} = \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2} \right)^2 + \frac{J^2 S}{2}, \quad (198)$$

$$M_{\mathbf{k}\downarrow}^{(3)} = \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2} \right)^3 + J^2 S \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{J(S+1)}{4} \right). \quad (199)$$

7.3 Restterm der Streuzustände

Wenden wir den Hamiltonoperator (2.2) auf die Streuzustände (2.50) an, ergibt sich

$$\begin{aligned} \mathcal{H}|\mathbf{k} - \mathbf{q} \uparrow; \mathbf{q}\rangle^{\pm} &= \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} \left[\left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \frac{JS}{2} \right) |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle - J \sqrt{\frac{S}{2N}} \sum_{\mathbf{q}'} |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle \right] \\ &+ \sum_{\mathbf{q}'} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} \left[\left(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \frac{JS}{2} \right) |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle - J \sqrt{\frac{S}{2N}} |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle + \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{p}} |\mathbf{k} - \mathbf{p} \uparrow; \mathbf{p}\rangle \right] \\ &= \left(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \frac{JS}{2} \right) \left(\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle + \sum_{\mathbf{q}'} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle \right) \\ &+ \left(\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + JS) - J \sqrt{\frac{S}{2N}} \sum_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{p}}^{\mathbf{k}} \right) |\mathbf{k} \downarrow; 0\rangle \\ &+ \sum_{\mathbf{q}'} \left(\beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - J \sqrt{\frac{S}{2N}} \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} + \frac{J}{2N} \sum_{\mathbf{p}} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{p}}^{\mathbf{k}} \right) |\mathbf{k} - \mathbf{q}' \uparrow; \mathbf{q}'\rangle. \end{aligned} \quad (200)$$

In der dritten Zeile steht wieder der Streuzustand, multipliziert mit einem Energiewert im Bereich des Streuspektrums. Die letzten beiden Zeilen bilden den Restterm. Mit Hilfe der Beziehung

$$\sum_{\mathbf{q}'} \beta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}^{\mathbf{k}} = \frac{\sqrt{2NS}}{JS} \alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + JS), \quad (201)$$

die man aus den Definitionen (2.51) der Koeffizienten ableiten kann, erkennt man, dass der Vorfaktor des Down-Zustandes verschwindet. Es bleibt also nur die letzte

Zeile auszuwerten und man erhält:

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{\mathbf{k}\pm} &= \beta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{\mathbf{k}}(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}) - J\sqrt{\frac{S}{2N}}\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}} + \frac{J}{2N}\sum_{\mathbf{p}}\beta_{\mathbf{q},\mathbf{p}}^{\mathbf{k}} = \underbrace{\delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})}_{\equiv 0} \\
&+ \left(\left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \right) (\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - (\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})) \right) \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}}}{\sqrt{2NS}} \\
&= \frac{\alpha_{\mathbf{q}}^{\mathbf{k}}}{\sqrt{2NS}} \left\{ \frac{2(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'})(\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}})}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \pm i0^+ \frac{2\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'} \pm i0^+} \right\}. \quad (202)
\end{aligned}$$

7.4 Koeffizienten der Langzeitentwicklung

$$\begin{aligned}
x_s^{\text{I/II}} &= -\left(\frac{JS}{2} + \frac{1}{2}\right) : \\
C_s^{\text{I/II}} &= -\frac{4(-1)^{3/4}\text{H}\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)J^2S\left(3\sqrt{2}\text{H}'\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right) + 2\text{H}\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)\right)}{\left((2\epsilon_{\mathbf{k}} + 1)\left(\sqrt{2}\text{H}\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)^2J + 1\right) + 2JS\right)^2}, \quad (203)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_s^{\text{II/III}} &= -\left(\frac{JS}{2} + \frac{1}{6}\right) : \\
C_s^{\text{II/III}} &= -\frac{324(1-i)\sqrt{3}\text{H}\left(\frac{2+5i\sqrt{2}}{4}\right)J^2S\left(9i\text{H}'\left(\frac{2+5i\sqrt{2}}{4}\right) + \sqrt{2}\text{H}\left(\frac{2+5i\sqrt{2}}{4}\right)\right)}{\left(6JS + (6\epsilon_{\mathbf{k}} + 1)\left(1 - 3i\sqrt{2}\text{H}\left(\frac{2+5i\sqrt{2}}{4}\right)^2J\right)\right)^2}, \quad (204)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_s^{\text{III/IV}} &= -\left(\frac{JS}{2} - \frac{1}{6}\right) : \\
C_s^{\text{III/IV}} &= \frac{324(1+i)\sqrt{3}\text{H}\left(\frac{2-5i\sqrt{2}}{4}\right)J^2S\left(\sqrt{2}\text{H}\left(\frac{2-5i\sqrt{2}}{4}\right) - 9i\text{H}'\left(\frac{2-5i\sqrt{2}}{4}\right)\right)}{\left(6JS + (6\epsilon_{\mathbf{k}} - 1)\left(1 - 3i\sqrt{2}\text{H}\left(\frac{2-5i\sqrt{2}}{4}\right)^2J\right)\right)^2}, \quad (205)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_s^{\text{IV/I}} &= -\left(\frac{JS}{2} - \frac{1}{2}\right) : \\
C_s^{\text{IV/I}} &= \frac{4\sqrt{-1}\text{H}\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)J^2S\left(3\sqrt{2}\text{H}'\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right) + 2\text{H}\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)\right)}{\left((2\epsilon_{\mathbf{k}} - 1)\left(\sqrt{2}\text{H}\left(\frac{2-\sqrt{2}}{4}\right)^2J - 1\right) - 2JS\right)^2}, \quad (206)
\end{aligned}$$

wobei $\text{H}(z) = {}_2F_1\left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}; 1; z\right)$ die Gauß'sche hypergeometrische Funktion bezeichnet.

8 Hubbardmodell

8.1 (Anti-)Kommutatoren zur Berechnung der Spektralmomente nach Harris und Lange

Die Operatoren mit Tilde sind folgendermaßen definiert:

$$\tilde{c}_{i\sigma;0} = (1 - n_{i-\sigma})c_{i\sigma}, \quad \tilde{c}_{i\sigma;-U} = n_{i-\sigma}c_{i\sigma} \quad (207)$$

und

$$(\tilde{c}_{i\sigma;pU})^+ = \tilde{c}_{i\sigma;-pU}^+. \quad (208)$$

Sie gehorchen den Vertauschungsrelationen:

$$[\tilde{c}_{i\sigma;0}, \tilde{c}_{j\sigma';0}^+]_+ = \delta_{ij}^{\sigma\sigma'} (1 - n_{i-\sigma}) + \delta_{ij}^{\sigma-\sigma'} c_{i-\sigma}^+ c_{i\sigma}, \quad (209)$$

$$[\tilde{c}_{i\sigma;0}, \tilde{c}_{j\sigma';U}^+]_+ = 0, \quad (210)$$

$$[\tilde{c}_{i\sigma;-U}, \tilde{c}_{j\sigma';0}^+]_+ = 0, \quad (211)$$

$$[\tilde{c}_{i\sigma;-U}, \tilde{c}_{j\sigma';U}^+]_+ = \delta_{ij}^{\sigma\sigma'} n_{i-\sigma} - \delta_{ij}^{\sigma-\sigma'} c_{i-\sigma}^+ c_{i\sigma}, \quad (212)$$

$$[\tilde{c}_{i\sigma;0}, \tilde{c}_{j\sigma';0}]_+ = 0, \quad (213)$$

$$[\tilde{c}_{i\sigma;0}, \tilde{c}_{j\sigma';-U}]_+ = \delta_{ij}^{\sigma-\sigma'} c_{i\sigma} c_{i-\sigma}. \quad (214)$$

8.2 Spektralmomente

Für den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} \underbrace{(t_{ij} + \delta_{ij}(t_0 - \mu - \frac{B}{2}z_\sigma))}_{t_{ij}^\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (215)$$

ergeben sich über die Rechenvorschrift (185) die folgenden Spektralmomente:

$$M_{ij\sigma}^{(0)} = \delta_{ij}, \quad (216)$$

$$M_{ij\sigma}^{(1)} = t_{ij}^\sigma + \delta_{ij} U \langle n_{i-\sigma} \rangle, \quad (217)$$

$$M_{ij\sigma}^{(2)} = \sum_l t_{il}^\sigma t_{lj}^\sigma + t_{ij}^\sigma U (\langle n_{i-\sigma} \rangle + \langle n_{j-\sigma} \rangle) + \delta_{ij} U^2 \langle n_{i-\sigma} \rangle \quad (218)$$

$$\begin{aligned} M_{ij\sigma}^{(3)} &= \sum_{l,m} t_{il}^\sigma t_{lm}^\sigma t_{mj}^\sigma + U \sum_l t_{il}^\sigma t_{lj}^\sigma (\langle n_{i-\sigma} \rangle + \langle n_{l-\sigma} \rangle + \langle n_{j-\sigma} \rangle) + U^2 t_{ij}^\sigma (2 \langle n_{i-\sigma} \rangle + \langle n_{j-\sigma} \rangle) \\ &\quad + U^2 t_{ij} \left(\langle n_{i-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle - \langle n_{i-\sigma} \rangle + \left\langle c_{j-\sigma}^+ c_{j\sigma}^+ c_{i-\sigma} c_{i\sigma} \right\rangle + \left\langle c_{j\sigma}^+ c_{i-\sigma}^+ c_{i\sigma} c_{j-\sigma} \right\rangle \right) \\ &\quad + U^2 \delta_{ij} \sum_l t_{il} \left\langle c_{l-\sigma}^+ c_{i-\sigma} (2n_{l\sigma} - 1) \right\rangle + U^3 \delta_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (219)$$

Die fouriertransformierten Spektralmomente sind dann durch:

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(0)} = 1, \quad (220a)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - z_\sigma \frac{B}{2}) + U \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad (220b)$$

$$M_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - z_\sigma \frac{B}{2})^2 + 2U(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - z_\sigma \frac{B}{2}) \langle n_{-\sigma} \rangle + U^2 \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad (220c)$$

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}\sigma}^{(3)} &= (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - z_\sigma \frac{B}{2})^3 + 3U(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - z_\sigma \frac{B}{2})^2 \langle n_{-\sigma} \rangle + 3U^2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - z_\sigma \frac{B}{2}) \langle n_{-\sigma} \rangle \\ &\quad + U^2 (B_{\mathbf{k}-\sigma} - \langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0)) + U^3 \langle n_{-\sigma} \rangle \end{aligned} \quad (220d)$$

gegeben.

8.3 Gitterzustandsdichten

Wir betrachten im Folgenden ein d -dimensionales, hyperkubisches Gitter. Die Gitterzustandsdichte zum Gittervektor \mathbf{R} ist dann definiert als

$$\rho_{\mathbf{R}}^{(d)}(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} \delta(x - \epsilon_{\mathbf{k}}). \quad (221)$$

Die Wahl von \mathbf{R} macht die Gitterzustandsdichte noch nicht eindeutig, da alle symmetrieäquivalenten Gitterpunkte, die auf einer Koordinationsschale um den Ursprung liegen, zur selben Zustandsdichte führen. Insbesondere liegt bei inversionssymmetrischen Gittertypen auch $-\mathbf{R}$ auf der jeweiligen Koordinationsschale. Somit können wir (221) weiter umformen zu:

$$\rho_d^{\mathbf{R}}(x) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \cos(n_1 k_1 + \dots + n_d k_d) \delta(x + 2t(\cos k_1 + \dots + \cos k_d)) \quad (222)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \cos n_1 k_1 \dots \cos n_d k_d \delta(x + 2t(\cos k_1 + \dots + \cos k_d)) \quad (223)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} T_{n_1}(\cos k_1) \dots T_{n_d}(\cos k_d) \delta(x + 2t(\cos k_1 + \dots + \cos k_d)), \quad (224)$$

wobei $T_n(x)$ das n -te Tschebyscheff-Polynom bezeichnet, $n_i \geq 0$ und $t > 0$ gilt. Mit Hilfe der eindimensionalen Gitterzustandsdichte:

$$\rho_1^{(n)}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk T_n(\cos k) \delta(x + 2t \cos k) = \frac{T_n(-\frac{x}{2t})}{\pi \sqrt{4t^2 - x^2}} \Theta(2t - |x|) \quad (225)$$

kann die gesamte Gitterzustandsdichte als ein Faltungsintegral dargestellt werden:

$$\rho_d^{\mathbf{R}}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx_2 \dots dx_d \rho_1^{(n_1)}(x - x_2 - \dots - x_d) \rho_1^{(n_2)}(x_2) \dots \rho_1^{(n_d)}(x_d). \quad (226)$$

Die Fouriertransformierte der eindimensionalen Gitterzustandsdichte errechnet sich zu:

$$\mathcal{F}\{\rho_1^{(n)}(x)\}(h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-2t}^{2t} dx e^{-ixh} \frac{T_n(-\frac{x}{2t})}{\pi \sqrt{4t^2 - x^2}} = \frac{i^n}{\sqrt{2\pi}} J_n(2th). \quad (227)$$

Unter Benutzung des Faltungstheorems kann somit die Gitterzustandsdichte auch folgendermaßen berechnet werden:

$$\rho_d^{\mathbf{R}}(x) = \frac{i^{n_1 + \dots + n_d}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ihx} J_{n_1}(2th) \dots J_{n_d}(2th). \quad (228)$$

Aus dieser Darstellung lässt sich mit Hilfe der Reihendarstellung der n -ten Besselfunktion [1]:

$$J_n(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^n \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{z^2}{4}\right)^k}{k! \Gamma(n+k+1)} \quad (229)$$

eine Abschätzung für das Verhalten der Gitterzustandsdichte im Grenzfall $d \rightarrow \infty$ gewinnen. Wie in Kapitel 3.2.5 begründet wurde, muss dabei der Hoppingparameter gemäß $t \rightarrow t^* \sqrt{2d}$ skaliert werden. Damit ergibt sich:

$$\begin{aligned} \rho_d^{\mathbf{R}}(x) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ihx} \left(\frac{it^*h}{\sqrt{2d}} \right)^{n_1+\dots+n_d} \prod_{l=1}^d \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{(ht^*)^2}{2d} \right)^k}{k! \Gamma(n_l + k + 1)} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\frac{t^*}{\sqrt{2d}} \partial_x \right)^{n_1+\dots+n_d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ihx} \prod_{l=1}^d \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\left(-\frac{(ht^*)^2}{2d} \right)^k}{k! (n_l + k)!} \right). \end{aligned} \quad (230)$$

Entwickelt man den (exponenzierten) Logarithmus des Produkts unter dem Integral, so erhält man:

$$\rho_d^{\mathbf{R}}(x) = \frac{1}{2\pi} \left(\frac{t^*}{\sqrt{2d}} \partial_x \right)^{n_1+\dots+n_d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ihx} \times \quad (231)$$

$$\begin{aligned} &\exp \left(- \sum_{l=1}^d \left(\log n_l! + \frac{(ht^*)^2}{2(1+n_l)d} + \frac{(ht^*)^4}{8(1+n_l)^2(2+n_l)d^2} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{d} \right)^3 \right) \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} \left(\prod_{l=1}^d \frac{1}{n_l!} \right) \left(\frac{t^*}{\sqrt{2d}} \partial_x \right)^{n_1+\dots+n_d} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ihx} \times \\ &e^{-\frac{(ht^*)^2}{2d} \sum_{l=1}^d \frac{1}{n_l+1}} \left\{ 1 - \frac{(ht^*)^4}{8d^2} \sum_{l=1}^d \frac{1}{(1+n_l)^2(2+n_l)} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{d} \right)^3 \right\}. \end{aligned} \quad (232)$$

Mit den Definitionen:

$$S_1 = \frac{1}{d} \sum_{l=1}^d \frac{1}{n_l + 1}; \quad S_2 = \frac{1}{d} \sum_{l=1}^d \frac{1}{(1+n_l)^2(2+n_l)} \quad (233)$$

ergibt sich nach Ausführung der Fouriertransformation:

$$\begin{aligned} \rho_d^{\mathbf{R}}(x) &= \frac{1}{t^* \sqrt{2\pi S_1}} \left(\prod_{l=1}^d \frac{1}{n_l!} \right) \left(\frac{t^*}{\sqrt{2d}} \partial_x \right)^{n_1+\dots+n_d} \left\{ e^{-\frac{x^2}{2S_1 t^{*2}}} \times \right. \\ &\quad \left. \left(1 - \frac{1}{d} S_2 \left(\frac{x^4 - 6S_1 t^{*2} x^2 + 3S_1^2 t^{*4}}{8S_1^4 t^{*4}} \right) + \mathcal{O} \left(\frac{1}{d} \right)^2 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (234)$$

Damit ist gezeigt, dass die Gitterzustandsdichte für $\mathbf{R} = n_1 \vec{e}_1 + \dots + n_d \vec{e}_d$ im Grenzfall $d \rightarrow \infty$ wie:

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \rho_d^{\mathbf{R}} \sim \mathcal{O} \left(\frac{1}{d} \right)^{\frac{1}{2} \sum_{l=1}^d |n_l|} \quad (235)$$

verschwindet. Dies überträgt sich dann direkt auf die freie Greenfunktion. Eine Abschätzung wie (235) wurde bereits in [26] für Korrelationsfunktionen abgeleitet, allerdings ohne den $1/d$ Korrekturterm. Für $\mathbf{R} = 0$ gilt $S_1 = 1$ und $S_2 = \frac{1}{2}$ und wir erhalten das schon bekannte Resultat (3.74) für die freie Zustandsdichte im Grenzfall

$d \rightarrow \infty$ und die erste Korrektur in $1/d$.

8.4 Rothmethode

Das folgende Kapitel erläutert die Anwendung eines Entkopplungsschemas für die Bewegungsgleichungshierarchie der Greenfunktionen auf das Hubbardmodell, wie sie erstmalig von Laura M. Roth [117] durchgeführt wurde. Wir folgen dabei weitestgehend der Originalarbeit, allerdings nun für einen Hamiltonoperator mit äußerem B -Feld. Druckfehler der Originalarbeit wurden stillschweigend korrigiert. Die sich ergebende Selbstenergie ist äquivalent zur SDA-Selbstenergie aus Kapitel 3.3.1. Die Rothmethode bietet aber die Möglichkeit einer sehr eleganten Ableitung zur Approximation der in der SDA auftretenden, höheren Korrelationsfunktionen.

Um die Bewegungsgleichungshierarchie der Greenfunktion (GF) lösen zu können, muss für einen Satz von Operatoren $\{A_n\}$ die Beziehung

$$\mathcal{L}(A_n) = [A_n, \mathcal{H}] = \sum_m K_{nm} A_m \quad (236)$$

gelten, d.h. die Menge der Operatoren muss unter Anwendung des Liouvilleoperators invariant sein. Für einen Vielteilchen-Hamiltonoperator wird sich eine solche Beziehung im Allgemeinen nicht finden lassen. Mit (236) muss dann aber auch

$$\langle \{[A_n, \mathcal{H}], A_p^+\} \rangle = \sum_m K_{nm} \langle \{A_m, A_p^+\} \rangle \quad (237)$$

für die thermodynamischen Erwartungswerte erfüllt sein. Definiert man die Matrizen:

$$E_{nm} = \langle \{[A_n, \mathcal{H}], A_m^+\} \rangle, \quad (238)$$

$$N_{nm} = \langle \{A_n, A_m^+\} \rangle, \quad (239)$$

können wir Gleichung (237) auch in Matrixschreibweise als

$$\mathbf{E} = \mathbf{K} \mathbf{N} \quad (240)$$

schreiben. Mit Hilfe dieser Beziehung können wir die Matrix \mathbf{K} für einen Satz von vorgegebenen Operatoren bestimmen und die Bewegungsgleichung entkoppeln²⁵. Für eine konkrete GF gilt dann

$$E \langle \langle A_n; B \rangle \rangle = \langle \{A_n; B\} \rangle + \sum_m K_{nm} \langle \langle A_m; B \rangle \rangle. \quad (241)$$

Löst man diese Gleichung nach der gesuchten GF auf, erhält man

$$\langle \langle A_n; B \rangle \rangle = \sum_m \tilde{G}_{nm} \langle \{A_m, B\} \rangle \quad (242)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{G}} = \left[(E + i0^+) \mathbf{1} - \mathbf{K} \right]^{-1} = \mathbf{N} \left[(E + i0^+) \mathbf{N} - \mathbf{E} \right]^{-1}. \quad (243)$$

²⁵Dies setzt natürlich bestimmte Eigenschaften der Matrizen \mathbf{E} und \mathbf{N} voraus, um nach \mathbf{K} auflösen zu können.

Ist nun speziell der Operator B aus der Menge $\{A_n\}$, so gilt für die Greenmatrix $G_{nm} = \langle\langle A_n; A_m \rangle\rangle$:

$$\mathbf{G} = \mathbf{N} \left[(E + i0^+) \mathbf{N} - \mathbf{E} \right]^{-1} \mathbf{N}. \quad (244)$$

Die soeben dargestellte Methode soll nun auf das Hubbardmodell mit dem Hamiltonoperator:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \frac{B}{2} \sum_{i\sigma} z_\sigma \hat{n}_{i\sigma} \quad (245)$$

angewendet werden. Wählt man die beiden Operatoren

$$A_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = c_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{l\sigma}, \quad (246)$$

$$A_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = d_{\mathbf{k}\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} n_{l-\sigma} c_{l\sigma},$$

so ergibt sich für die Matrizen \mathbf{E} und \mathbf{N} :

$$\mathbf{E}_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} - z_\sigma \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle & (\epsilon_{\mathbf{k}} - z_\sigma \frac{B}{2} + U) \langle n_{-\sigma} \rangle \\ (\epsilon_{\mathbf{k}} - z_\sigma \frac{B}{2} + U) \langle n_{-\sigma} \rangle & (t_0 - z_\sigma \frac{B}{2} + U) \langle n_{-\sigma} \rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \langle n_{-\sigma} \rangle^2 + B_{\mathbf{k}-\sigma} \end{pmatrix}, \quad (247)$$

$$\mathbf{N}_{\mathbf{k}\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & \langle n_{-\sigma} \rangle \\ \langle n_{-\sigma} \rangle & \langle n_{-\sigma} \rangle \end{pmatrix}, \quad (248)$$

mit

$$B_{\mathbf{k}\sigma} = \sum_l t_{il} \left\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{l\sigma} (n_{i-\sigma} + n_{l-\sigma} - 1) \right\rangle + \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left(\langle n_{i\sigma} n_{j\sigma} \rangle - \langle n_\sigma \rangle^2 + \langle c_{i-\sigma}^\dagger c_{i\sigma}^\dagger c_{j-\sigma} c_{j\sigma} \rangle + \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i-\sigma} c_{j-\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \right). \quad (249)$$

Aus (240) folgt dann

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \epsilon_{\mathbf{k}} - z_\sigma \frac{B}{2} & U \\ \langle n_{-\sigma} \rangle (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{1 - \langle n_{-\sigma} \rangle} & U + t_0 - z_\sigma \frac{B}{2} + \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} \end{pmatrix} \quad (250)$$

und damit aus (243)

$$\tilde{\mathbf{G}} = \frac{1}{D_{\mathbf{k}\sigma}(E)} \begin{pmatrix} E - U - t_0 + z_\sigma \frac{B}{2} - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} & U \\ \langle n_{-\sigma} \rangle \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0 - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} \right) & E - \epsilon_{\mathbf{k}} + z_\sigma \frac{B}{2} \end{pmatrix} \quad (251)$$

mit

$$D_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \left(E + i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}} + z_{\sigma} \frac{B}{2} \right) \left(E + i0^+ - U - t_0 + z_{\sigma} \frac{B}{2} - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} \right) - U \langle n_{-\sigma} \rangle \left(\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0 - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)} \right). \quad (252)$$

Die Ein-Elektronen-GF ist dann das $(1, 1)$ -Element der Greenmatrix (244). Für sie findet man:

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; c_{\mathbf{k}\sigma}^+ \rangle\rangle = \frac{1}{E + i0^+ - \epsilon_{\mathbf{k}} + z_{\sigma} \frac{B}{2} - U \langle n_{-\sigma} \rangle \frac{\frac{E + i0^+ + z_{\sigma} \frac{B}{2} - t_0 - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}}{E + i0^+ + z_{\sigma} \frac{B}{2} - t_0 - U(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) - \frac{B_{\mathbf{k}-\sigma}}{\langle n_{-\sigma} \rangle (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}}}. \quad (253)$$

Die Rothmethode reproduziert also das SDA-Ergebnis. In der Lösung der Ein-Elektronen-GF tauchen Korrelationsfunktionen auf, die teilweise über das Spektraltheorem aus bekannten GF (selbstkonsistent) berechnet werden können. So haben wir:

$$\begin{aligned} \langle n_{\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \left(-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) \right] \end{aligned} \quad (254)$$

für die spinabhängige Bandbesetzung. In der zweiten Zeile haben wir noch eine abkürzende Schreibweise für das Integral über die Fermifunktion und die Spektraldichte eingeführt. Der wellenzahlunabhängige Teil von $B_{\mathbf{k}\sigma}$ (249) kann ebenfalls berechnet werden:

$$\sum_l t_{il} \langle c_{l\sigma}^+ c_{i\sigma} (2n_{i-\sigma} - 1) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[2G_{\mathbf{k}\sigma}^{(2,1)}(E) - G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) \right]. \quad (255)$$

Dies kann noch etwas vereinfacht werden, da $G^{(1,1)}$ und $G^{(2,1)}$ über eine Bewegungsgleichung zusammenhängen:

$$\left(E - \epsilon_{\mathbf{k}} + z_{\sigma} \frac{B}{2} \right) G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) = U G_{\mathbf{k}\sigma}^{(2,1)}(E). \quad (256)$$

Damit ergibt sich:

$$\sum_l t_{il} \langle c_{l\sigma}^+ c_{i\sigma} (2n_{i-\sigma} - 1) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[\left(\frac{2}{U} \left(E - \epsilon_{\mathbf{k}} + z_{\sigma} \frac{B}{2} \right) - 1 \right) G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) \right]. \quad (257)$$

Im \mathbf{k} -abhängigen Teil von (249) tauchen nun aber Korrelationsfunktionen auf, die sich nicht aus bereits bekannten GF berechnen lassen. Zu deren Berechnung werden neue GF der Form:

$$\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; B \rangle\rangle \quad (258)$$

mit passend gewähltem Operator B benötigt. Da der erste Operator in (258) aus unserer Menge der vorab gewählten Operatoren (246) stammt, können wir mit (243) und unter Anwendung des Spektraltheorems

$$\langle B c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \sum_{l=1}^2 \mathcal{S}_E \left[\tilde{G}_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,l)}(E) \right] \left\langle \{ A_{\mathbf{k}\sigma}^{(l)}, B \} \right\rangle \quad (259)$$

schreiben. Wie man sich leicht klar macht, sind die benötigten Operatoren:

$$B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} n_{l+j\sigma} c_{l\sigma}^+ \quad (260)$$

$$B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} n_{l+j-\sigma} c_{l\sigma}^+ \quad (261)$$

$$B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(3)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{l+j\sigma}^+ c_{l+j-\sigma} c_{l-\sigma}^+ \quad (262)$$

$$B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(4)} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_l e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} c_{l+j-\sigma}^+ c_{l+j\sigma}^+ c_{l-\sigma}. \quad (263)$$

Beginnen wir mit der Dichtekorrelationsfunktion, für die

$$\langle n_{j\sigma} n_{0\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(1)} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (264)$$

gilt. Die Korrelationsfunktionen auf der rechten Seite von (259) ergeben:

$$\langle \{ c_{\mathbf{k}\sigma}, B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(1)} \} \rangle = \delta_{j,0} + \langle n_{\sigma} \rangle - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \langle c_{0\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle, \quad (265)$$

$$\langle \{ d_{\mathbf{k}\sigma}, B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(1)} \} \rangle = \delta_{j,0} \langle n_{0-\sigma} \rangle + \langle n_{0-\sigma} n_{j\sigma} \rangle - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \langle c_{0\sigma}^+ n_{j-\sigma} c_{j\sigma} \rangle. \quad (266)$$

Mit den Abkürzungen²⁶

$$n_{j\sigma} = \langle c_{0\sigma}^+ c_{j\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) \right] e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad (267)$$

$$m_{j\sigma} = \langle c_{0\sigma}^+ n_{j-\sigma} c_{j\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[G_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,2)}(E) \right] e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (268)$$

und

$$\alpha_{j\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[\tilde{G}_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,1)}(E) \right] e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}, \quad (269)$$

$$\beta_{j\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{S}_E \left[\tilde{G}_{\mathbf{k}\sigma}^{(1,2)}(E) \right] e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \quad (270)$$

erhalten wir für die Dichtekorrelation

$$\langle n_{j\sigma} n_{0\sigma} \rangle = \alpha_{0\sigma} (\delta_{j,0} + n_{0\sigma}) - \alpha_{j\sigma} n_{j\sigma} + \beta_{0\sigma} (\delta_{j,0} n_{0-\sigma} + \langle n_{0-\sigma} n_{j\sigma} \rangle) - \beta_{j\sigma} m_{j\sigma}. \quad (271)$$

²⁶Es wurde angenommen, dass die Korrelationsfunktionen reell und invariant unter Austausch der Indizes 0 und j sind.

Man erkennt, dass noch die Dichtekorrelation entgegengesetzter Spins benötigt wird. Diese ergibt sich aus $B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(2)}$. Mit

$$\langle \{c_{\mathbf{k}\sigma}, B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(2)}\} \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle, \quad (272)$$

$$\langle \{d_{\mathbf{k}\sigma}, B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(2)}\} \rangle = \langle n_{0-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle \quad (273)$$

erhalten wir aus (259)

$$\langle n_{j-\sigma} n_{0\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(2)} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \alpha_{0\sigma} n_{0-\sigma} + \beta_{0\sigma} \langle n_{0-\sigma} n_{j-\sigma} \rangle. \quad (274)$$

Lassen wir in dieser Gleichung $\sigma \rightarrow -\sigma$ gehen und setzen das Resultat in (271) ein, erhalten wir:

$$\langle n_{j\sigma} n_{0\sigma} \rangle = \frac{\alpha_{0\sigma}(\delta_{j,0} + n_{0\sigma}) - \alpha_{j\sigma} n_{j\sigma} + \beta_{0\sigma}(\delta_{j,0} n_{0,-\sigma} + \alpha_{0-\sigma} n_{0\sigma}) - \beta_{j\sigma} m_{j\sigma}}{1 - \beta_{0\sigma} \beta_{0-\sigma}}. \quad (275)$$

Über (242) kann man noch die Beziehungen:

$$\alpha_{j\sigma} = \frac{n_{j\sigma} - m_{j\sigma}}{1 - n_{0-\sigma}}, \quad \beta_{j\sigma} = \frac{m_{j\sigma}/n_{0-\sigma} - n_{j\sigma}}{1 - n_{0-\sigma}} \quad (276)$$

ableiten. Mit diesen vereinfacht sich (275) unter der Voraussetzung $j \neq 0$ (der Fall $j = 0$ ist trivial) zu:

$$\langle n_{j\sigma} n_{0\sigma} \rangle - \langle n_{\sigma} \rangle^2 = -\frac{\alpha_{j\sigma} n_{j\sigma} + \beta_{j\sigma} m_{j\sigma}}{1 - \beta_{0\sigma} \beta_{0-\sigma}}. \quad (277)$$

Im Fall der Spinflip-Korrelationsfunktion findet man durch eine ähnliche Rechnung (wiederum für $j \neq 0$)

$$\langle c_{j\sigma}^+ c_{j-\sigma} c_{0-\sigma}^+ c_{0\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(3)} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = -\frac{\alpha_{j\sigma} n_{j-\sigma} + \beta_{j\sigma} m_{j-\sigma}}{1 + \beta_{0\sigma}}. \quad (278)$$

Die Doppelsprung-Korrelationsfunktion ergibt sich zu

$$\langle c_{j-\sigma}^+ c_{j\sigma}^+ c_{0-\sigma} c_{0\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle B_{j\mathbf{k}\sigma}^{(4)} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = -\frac{\alpha_{j\sigma} n_{j-\sigma} - \beta_{j\sigma} (n_{j-\sigma} - m_{j-\sigma})}{1 - \beta_{0\sigma}}. \quad (279)$$

8.5 Die Ozaki-Pol-Summation

Problembeschreibung

Um Korrelationsfunktionen und Suszeptibilitäten zu berechnen, haben wir Integrale der folgenden, allgemeinen Form zu bestimmen:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon(\mathbf{k}))^n \text{Im} \left\{ \frac{-1}{\pi} \int dE \frac{f_-(E) E^m}{E + i0^+ + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(E)} \right\}. \quad (280)$$

Ist die auftretende Selbstenergie lokal oder kann ihre Wellenzahlabhängigkeit durch $\epsilon_{\mathbf{k}}$ ausgedrückt werden, so kann das mehrdimensionale \mathbf{k} -Integral durch ein eindimensionales Integral über die Zustandsdichte ersetzt werden. Ist allerdings die Wellenzahlabhängigkeit der Selbstenergie komplizierter, so steht diese Möglichkeit nicht zur Verfügung und das volle, mehrdimensionale Integral muss berechnet werden. Um das \mathbf{k} -Integral ausführen zu können, muss zuerst das Energieintegral berechnet werden, da sonst die Polstellen der zu integrierenden Funktion eine Berechnung unmöglich machen würden. Auch das Energieintegral erstreckt sich über eine (fast) singuläre Funktion und wir werden uns der Mittel der Funktionentheorie bedienen, um es schnell und präzise zu berechnen.

Darstellung der Fermifunktion

Die Fermifunktion (multipliziert mit E^n) kann nach Ozaki [108] durch folgende Reihe approximiert werden:

$$f_{-}(E)E^n = \frac{E^n}{1 + \exp(\beta E)} \quad (281)$$

$$\approx \frac{1}{2}E^n + \sum_{p=1}^N \frac{R_p}{\beta} \sum_{m=0}^{n-1} \left[\alpha_p^{n-1-m} + (\alpha_p^*)^{n-1-m} \right] E^m \quad (282)$$

$$+ \sum_{p=1}^N \frac{R_p}{\beta} \left(\frac{\alpha_p^n}{E - \alpha_p} + \frac{(\alpha_p^*)^n}{E - \alpha_p^*} \right), \quad (283)$$

wobei die Polstellen α_p , die rein imaginär sind, und die zugehörigen Residuen R_p als Lösungen eines verallgemeinerten Eigenwertproblems gegeben sind (siehe [108]). Das Beeindruckende an dieser Darstellung der Fermifunktion ist die rasche Konvergenz der obigen Summe, sodass man schon mit wenigen (~ 100) Polen eine gute Approximation erhält. Die obige Darstellung konvergiert zum Beispiel um Größenordnungen besser als die Matsubarareihe, was der Autor auf die günstige (ungleichmäßige) Verteilung der Pole α_p auf der imaginären Achse zurückführt.

Damit ergibt sich unter Ausnutzung des Residuensatzes für das Energieintegral in (280):

$$\begin{aligned} \frac{-1}{\pi} \Im \left[\int dE \frac{f_{-}(E)E^n}{E + i0^+ + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(E)} \right] = \\ \frac{1}{2} M_{\mathbf{k}}^{(n)} + \sum_{m=0}^{n-1} \gamma_m M_{\mathbf{k}}^{(m)} - \Re \left[\frac{2}{\beta} \sum_{p=1}^N \frac{R_p \alpha_p^n}{\alpha_p + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\alpha_p)} \right], \end{aligned} \quad (284)$$

mit

$$\gamma_m = \sum_{p=1}^N \frac{R_p}{\beta} \left[\alpha_p^{n-1-m} + (\alpha_p^*)^{n-1-m} \right], \quad M_{\mathbf{k}}^{(m)} = \int dE E^m S_{\mathbf{k}}(E). \quad (285)$$

Benötigte Integrale

Für die Berechnung der statischen paramagnetischen Suszeptibilität des Hubbardmodells muss man Integrale der folgenden Form auswerten:

$$I(n, m, o) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^n \frac{1}{\pi} \int dE f_{-}(E) E^m \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^o}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(E))^2}. \quad (286)$$

Um das Integral (286) auf die richtige Form zu bringen, nutzen wir einen Trick:

$$\frac{1}{A^2} \approx \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{A^2 - V^2} = \lim_{V \rightarrow 0} \frac{1}{2V} \left\{ \frac{1}{A - V} - \frac{1}{A + V} \right\}. \quad (287)$$

Damit ergibt sich für ($m = 0$):

$$I(n, 0, o) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^n \frac{1}{V\beta} \Re \sum_{p=1}^N R_p \left(\frac{1}{\alpha_p + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\alpha_p) - V(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^o} \right. \quad (288)$$

$$\left. - \frac{1}{\alpha_p + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\alpha_p) + V(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^o} \right) \quad (289)$$

und für ($m = 1$):

$$I(n, 1, o) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^n \left\{ -\frac{1}{2} \delta_{o,0} + \frac{1}{V\beta} \Re \sum_{p=1}^N R_p \alpha_p \times \right. \\ \times \left(\frac{1}{\alpha_p + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\alpha_p) - V(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^o} - \frac{1}{\alpha_p + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(\alpha_p) + V(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^o} \right) \left. \right\}. \quad (290)$$

8.6 Die statische paramagnetische Suszeptibilität

Die statische paramagnetische Suszeptibilität ist als die Änderung der Magnetisierung bei angelegtem Magnetfeld, ausgehend von einer paramagnetischen Ausgangsphase, zu sehen:

$$\hat{\chi}^{(p)}(T) = \left(\frac{\partial m}{\partial B} \right) \\ = \sum_{\sigma} z_{\sigma} (\partial_B \langle n_{\sigma} \rangle)_{T; B=0; n_{\uparrow}=n_{\downarrow}}. \quad (291)$$

Wir können dies mit Hilfe des Spektraltheorems weiter umformen zu:

$$\begin{aligned}
 \hat{\chi}^{(p)}(T) &= \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \left(\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}\sigma}(E) \right) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \sum_{\sigma} z_{\sigma} (\partial_B S_{\mathbf{k}\sigma}(E)) \\
 &= \frac{-1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ \frac{\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}}(E))^2} \right\}. \quad (292)
 \end{aligned}$$

Wegen der Symmetrierelation $\partial_B \langle n_{\sigma} \rangle = -\partial_B \langle n_{-\sigma} \rangle$ können wir noch die folgende, wichtige Relation ableiten:

$$\partial_B \langle n_{\sigma} \rangle = \frac{1}{2} z_{\sigma} \chi^{(p)}(T). \quad (293)$$

An Gleichung (292) erkennt man, dass die Suszeptibilität im Wesentlichen durch die Ableitung der Selbstenergie nach dem äußeren B -Feld bestimmt ist. In den folgenden Unterabschnitten soll sie für verschiedene Näherungen des Hubbardmodells ausgewertet werden.

Hartree-Fock

Die Selbstenergie in HF ist gegeben durch (3.93). Damit ergibt sich für die paramagnetische Suszeptibilität:

$$\hat{\chi}^{(p)}(T) = \frac{A}{1 - UA} \quad (294)$$

mit:

$$A = \frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ \frac{1}{(E + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}}(E))^2} \right\}. \quad (295)$$

Störungstheorie zweiter Ordnung

Die Selbstenergie in zweiter Ordnung Störungstheorie ist gegeben durch (3.97). Für die Ableitung der Selbstenergie nach dem B-Feld ergibt sich dann:

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E)|_{B=0; \uparrow=\downarrow} &= -1 - U \chi^{(p)}(T) \\
&- U^2 \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int dx S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x) \int dy S_{\mathbf{R}}^{(0)}(y) \int dz \left(\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B (S_{-\mathbf{R}\sigma}^{(0)}(z)) \right) \frac{F(x, y, z)}{E - x - y + z} \\
&= -1 - U \chi^{(p)}(T) \\
&- JU^2 \chi^{(p)}(T) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int dx S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x) \int dy S_{\mathbf{R}}^{(0)}(y) \int dz S_{-\mathbf{R}}^{\prime(0)}(z) \frac{F(x, y, z)}{E - x - y + z}, \\
&= -1 - U \chi^{(p)}(T) \\
&- JU^2 \chi^{(p)}(T) \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int dx S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x) \int dy S_{\mathbf{R}}^{(0)}(y) \int dz S_{-\mathbf{R}}^{(0)}(z) \times \\
&\quad \left\{ \frac{f'_-(z)(f_-(x) + f_-(y) - 1)}{E - x - y + z} - \partial_E \frac{F(x, y, z)}{E - x - y + z} \right\}, \\
&= -1 - U \chi^{(p)}(T) - J \chi^{(p)}(T) \left(\Omega_{\mathbf{k}}(E) - \partial_E \Sigma_{\mathbf{k}}^{(\text{II})}(E) \right)
\end{aligned} \tag{296}$$

mit $J = (\int dx f_-(x) \partial_x S^{(0)}(x))^{-1} = \langle n' \rangle^{-1}$.

Einsetzen von (296) in (292) ergibt:

$$(1 - UA - JB) \hat{\chi}^{(p)}(T) = A. \tag{297}$$

mit:

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \text{Im} \left\{ \frac{1}{(E + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}}(E))^2} \right\}, \\
B &= \frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE f_-(E) \text{Im} \left\{ \frac{\Omega_{\mathbf{k}}(E) - \partial_E \Sigma_{\mathbf{k}}^{(\text{II})}(E)}{(E + \mu - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}}(E))^2} \right\}.
\end{aligned} \tag{298}$$

SDA+MPT

Die SDA- (Kapitel 3.3.1) und die MPT- (Kapitel 3.3.3) Selbstenergien können auf die gemeinsame Form

$$\begin{aligned}
\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) &= -z_{\sigma} \frac{B}{2} + \Sigma_{\sigma}^{HF} + \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{corr}(E) \\
&= -z_{\sigma} \frac{B}{2} + U \langle n_{-\sigma} \rangle + \left(F_{\mathbf{k}\sigma}(E) - \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{(C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^2} \right)^{-1}
\end{aligned} \tag{299}$$

gebracht werden. Für die Ableitung nach dem Feld ergibt sich:

$$\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}(E) = -1 - U \chi^{(p)}(T) - (\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{corr}(E))^2 \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \left(F_{\mathbf{k}\sigma}(E) - \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{(C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^2} \right). \quad (300)$$

Während die Ableitung von $F_{\mathbf{k}\sigma}(E)$ spezifisch für die jeweilige Näherung ist, kann die Ableitung der Koeffizienten der Hochenergieentwicklung sofort durchgeführt werden, wobei für $B_{W,\mathbf{k}-\sigma}$ die Näherung nach Roth (siehe Kapitel 8.4) verwendet werden soll:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \frac{C_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{(C_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)})^2} = & -\frac{\chi^{(p)}(T)}{U^2} \left(\frac{n-1}{(\frac{n}{2}(1-\frac{n}{2}))^2} \left(t_0 - \mu + \frac{2B_{\mathbf{k}}}{\frac{n}{2}(1-\frac{n}{2})} \right) - \frac{4U}{n^2} \right) \\ & - \frac{\frac{n}{2}(1-\frac{n}{2}) + \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{\mathbf{k}\sigma}}{(U \frac{n}{2}(1-\frac{n}{2}))^2}. \end{aligned} \quad (301)$$

Wegen

$$B_{\mathbf{k}\sigma} = B_{S,\sigma} + B_{W,\mathbf{k}\sigma} = B_{S,\sigma} + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) B_{W,\sigma} \quad (302)$$

bleibt noch zu berechnen:

$$\begin{aligned} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{S,\sigma} &= \frac{2}{U} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \int dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}}(E) \\ &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \int dE f_{-}(E) \left(\frac{2}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - 1 \right) \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B S_{\mathbf{k}\sigma}(E) \\ &= A^{(S)} + B^{(S)} \hat{\chi}^{(p)}(T) + C^{(S)} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{S,\sigma} + D^{(S)} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{W,\sigma}, \end{aligned} \quad (303)$$

und

$$\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{W,\sigma} = \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \left(\langle n_{0\sigma} n_{\Delta\sigma} \rangle - \langle n_{\sigma} \rangle^2 \right) \quad (304)$$

$$= C_1 \chi^{(p)}(T) + C_3 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \int dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}}(E) \quad (305)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \int dE f_{-}(E) \left(C_2 + \frac{C_3}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right) \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B S_{\mathbf{k}\sigma}(E) \\ &= A^{(\Delta)} + B^{(\Delta)} \hat{\chi}^{(p)}(T) + C^{(\Delta)} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{S,\sigma} + D^{(\Delta)} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{W,\sigma} \end{aligned}$$

mit

$$C_1 = \frac{-1}{1 - \beta_0^2} \left(\frac{n_j^2 - 2n_j m_j + \frac{2m_j}{n}}{(1 - \frac{n}{2})^2} - \left(\frac{2m_j}{n} \right)^2 \right), \quad (306)$$

$$C_2 = 2 \frac{n_j - m_j}{1 - \beta_0^2}, \quad (307)$$

$$C_3 = \frac{n_j + 4 \frac{m_j}{n}}{1 - \beta_0^2}. \quad (308)$$

Das obige Gleichungssystem kann nun gelöst werden:

$$\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{S,\sigma} = \frac{(A^{(S)} + B^{(S)} \hat{\chi}^{(p)}(T))(1 - D^{(\Delta)}) + D^{(S)}(A^{(\Delta)} + B^{(\Delta)} \hat{\chi}^{(p)}(T))}{(1 - C^{(S)})(1 - D^{(\Delta)}) - D^{(S)}C^{(\Delta)}}, \quad (309)$$

$$\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{W,\sigma} = \frac{(A^{(\Delta)} + B^{(\Delta)} \hat{\chi}^{(p)}(T))(1 - C^{(S)}) + C^{(\Delta)}(A^{(S)} + B^{(S)} \hat{\chi}^{(p)}(T))}{(1 - C^{(S)})(1 - D^{(\Delta)}) - D^{(S)}C^{(\Delta)}}.$$

Die paramagnetische Suszeptibilität kann damit angegeben werden:

$$\begin{aligned} \hat{\chi}^{(p)}(T) &= A^{(p)} + B^{(p)} \hat{\chi}^{(p)}(T) + C^{(p)} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{S,\sigma} + D^{(p)} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B B_{W,\sigma} \quad (310) \\ &= \frac{A^{(p)} + \frac{C^{(p)}(A^{(S)}(1-D^{(\Delta)})+D^{(S)}A^{(\Delta)})+D^{(p)}(A^{(\Delta)}(1-C^{(S)})+C^{(\Delta)}A^{(S)})}{(1-C^{(S)})(1-D^{(\Delta)})-D^{(S)}C^{(\Delta)}}}{1 - B^{(p)} - \frac{C^{(p)}(B^{(S)}(1-D^{(\Delta)})+D^{(S)}B^{(\Delta)})+D^{(p)}(B^{(\Delta)}(1-C^{(S)})+C^{(\Delta)}B^{(S)})}{(1-C^{(S)})(1-D^{(\Delta)})-D^{(S)}C^{(\Delta)}}}. \end{aligned}$$

Die in (310) auftretenden Konstanten werden wie folgt berechnet:

$$A^{(p)} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^{-2} \left[1 + \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{U^2 \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2})} \right] \right\}, \quad (311)$$

$$\begin{aligned} B^{(p)} &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^{-2} \left[U + (\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2 \times \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \times \left(\hat{F}_{\mathbf{k}}(E) + \frac{n-1}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \left(t_0 - \mu + \frac{2(B_S + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0)B_W)}{\frac{n}{2}(1 - \frac{n}{2})} \right) - \frac{4}{Un^2} \right) \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$C^{(p)} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^{-2} \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \right\},$$

$$D^{(p)} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int dE f_{-}(E) \text{Im} \left\{ (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^{-2} \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \right\}$$

und

$$\begin{aligned}
 A^{(S)} &= \frac{2}{U} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}}(E) \\
 &\quad + \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(\frac{2}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - 1 \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \left[1 + \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{U^2 \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2})} \right] \right\}, \\
 B^{(S)} &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(\frac{2}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - 1 \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \left[U + (\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2 \times \right. \right. \\
 &\quad \times \left. \left(\hat{F}_{\mathbf{k}}(E) + \frac{n-1}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \left(t_0 - \mu + \frac{2(B_S + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) B_W)}{\frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2})} \right) - \frac{4}{U n^2} \right) \right] \right\}, \\
 C^{(S)} &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(\frac{2}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - 1 \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \right\}, \\
 D^{(S)} &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0)^2 \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(\frac{2}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) - 1 \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \right\},
 \end{aligned} \tag{312}$$

$$\begin{aligned}
 A^{(\Delta)} &= C_3 \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \int dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}}(E) \\
 &\quad + \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(C_2 + C_3 \frac{1}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \left[1 + \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{U^2 \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2})} \right] \right\}, \\
 B^{(\Delta)} &= C_1 + \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(C_2 + C_3 \frac{1}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \left[U + (\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2 \times \right. \right. \\
 &\quad \times \left. \left(\hat{F}_{\mathbf{k}}(E) + \frac{n-1}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \left(t_0 - \mu + \frac{2(B_S + (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) B_W)}{\frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2})} \right) - \frac{4}{U n^2} \right) \right] \right\}, \\
 C^{(\Delta)} &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(C_2 + C_3 \frac{1}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \right\}, \\
 D^{(\Delta)} &= \frac{1}{\pi} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} (\epsilon_{\mathbf{k}} - t_0) \int dE f_{-}(E) \operatorname{Im} \left\{ \frac{\left(C_2 + C_3 \frac{1}{U} (E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}}) \right)}{(E + \mu - \epsilon_{\mathbf{k}} - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma})^2} \frac{(\Sigma_{\mathbf{k}}^{corr}(E))^2}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2} \right\}.
 \end{aligned} \tag{313}$$

SDA

$$\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B F_{\mathbf{k}\sigma}(E) = \chi^{(p)}(T) \frac{(1-n)E}{(U \frac{n}{2} (1 - \frac{n}{2}))^2}. \tag{314}$$

MPT

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B F_{\mathbf{k}\sigma}(E) &= \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \left(\left(\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{SOC}(E) \right)^{-1} + \frac{D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{\left(D_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} \right)^2} \right) \\
&= - \frac{\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{SOC}(E)}{\left(\Sigma_{\mathbf{k}}^{SOC}(E) \right)^2} + \frac{\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)}}{\left(D_{\mathbf{k}}^{(1)} \right)^2} \\
&\quad - 2 \frac{D_{\mathbf{k}}^{(2)}}{\left(D_{\mathbf{k}}^{(1)} \right)^3} \sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B D_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)}. \tag{315}
\end{aligned}$$

Für die benötigten Ableitungen ergibt sich:

$$\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B D_{\mathbf{k}\sigma}^{(1)} = \hat{\chi}^{(p)}(T) U^2 (n-1), \tag{316}$$

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B D_{\mathbf{k}\sigma}^{(2)} &= U^2 \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int dx S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x) \int dy S_{\mathbf{R}}^{(0)}(y) \times \\
&\quad \times \int dz \sum_{\sigma} \left(z_{\sigma} \partial_B S_{-\mathbf{R}-\sigma}^{(0)}(z) \right) F(x, y, z) (x + y - z) \tag{317}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= - \left(\sum_{\sigma} z_{\sigma} \partial_B \mu_{\sigma} \right) U^2 \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \int dx S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x) \int dy S_{\mathbf{R}}^{(0)}(y) \times \\
&\quad \times \int dz (\partial_z S_{-\mathbf{R}}^{(0)}(z)) F(x, y, z) (x + y - z) \\
&= -U^2 \frac{\hat{\chi}^{(p)}(T)}{\langle n'_{\mathbf{0}} \rangle} \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} \left\{ \delta_{\mathbf{R},\mathbf{0}} \left(2(M_{\mathbf{R}} - \langle e_{\mathbf{R}} \rangle) \langle n'_{\mathbf{R}} \rangle + \langle e'_{\mathbf{R}} \rangle (2 \langle n_{\mathbf{R}} \rangle - 1) + \langle n_{\mathbf{R}} \rangle^2 \right) \right. \\
&\quad \left. - 2M_{\mathbf{R}} \langle n'_{\mathbf{R}} \rangle \langle n_{\mathbf{R}} \rangle \right\} \tag{318}
\end{aligned}$$

mit:

$$M_{\mathbf{R}} = T_{\mathbf{R}} - \mu \delta_{\mathbf{R},\mathbf{0}} \tag{319}$$

$$\langle n_{\mathbf{R}} \rangle = \int dx f_{-}(x) S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x), \quad \langle n'_{\mathbf{R}} \rangle = \int dx f_{-}(x) S'_{\mathbf{R}}^{(0)}(x), \tag{320}$$

$$\langle e_{\mathbf{R}} \rangle = \int dx f_{-}(x) x S_{\mathbf{R}}^{(0)}(x), \quad \langle e'_{\mathbf{R}} \rangle = \int dx f_{-}(x) x S'_{\mathbf{R}}^{(0)}(x). \tag{321}$$

Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz und I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publications, 1964.
- [2] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov und I.E. Dzyaloshinski. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Dover, New York, N.Y., 1963.
- [3] H. Akai. Ferromagnetism and Its Stability in the Diluted Magnetic Semiconductor (In, Mn)As. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3002–3005, Oct 1998.
- [4] Fabien Alet, Stefan Wessel und Matthias Troyer. Generalized directed loop method for quantum Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. E*, 71:036706, Mar 2005.
- [5] P. W. Anderson. New Approach to the Theory of Superexchange Interactions. *Phys. Rev.*, 115:2–13, Jul 1959.
- [6] S. Bei der Kellen, W. Nolting und G. Borstel. Magnetic phase transitions in narrow nondegenerate energy bands. *Phys. Rev. B*, 42:447–457, Jul 1990.
- [7] Mona Berciu und George A. Sawatzky. Ferromagnetic spin polaron on complex lattices. *Phys. Rev. B*, 79:195116, May 2009.
- [8] Dominic Bergeron, Vasyl Hankevych, Bumsoo Kyung und A.-M. S. Tremblay. Optical and dc conductivity of the two-dimensional Hubbard model in the pseudogap regime and across the antiferromagnetic quantum critical point including vertex corrections. *Phys. Rev. B*, 84:085128, Aug 2011.
- [9] F. Bloch. Bemerkung zur Elektronentheorie des Ferromagnetismus und der elektrischen Leitfähigkeit. *Zeitschrift für Physik*, 57:545–555, 1929.
- [10] F. Bloch. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 61:206–219, 1930.
- [11] G. Borstel, W. Borgiel und W. Nolting. Quasiparticle band structure of ferromagnetic EuS. *Phys. Rev. B*, 36:5301–5305, Oct 1987.
- [12] R. M. Bozorth. Magnetism. *Rev. Mod. Phys.*, 19:29–86, Jan 1947.
- [13] Henrik Bruus und Karsten Flensberg. *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford Graduate Texts. Oxford Univ. Press, Oxford, 2004.
- [14] G. Bulk und R. J. Jelitto. Perturbational treatment of correlation effects in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 41:413–427, Jan 1990.

- [15] G. Busch, P. Junod und P. Wachter. Optical absorption of ferro- and antiferromagnetic europium chalcogenides. *Physics Letters*, 12(1):11 – 12, 1964.
- [16] J. Callaway, D. P. Chen und R. Tang. Ground-state and thermodynamic properties of the Hubbard model applied to small clusters. *Phys. Rev. B*, 35: 3705–3714, Mar 1987.
- [17] H. Capellmann. *Metallic Magnetism*. Springer, Berlin, Germany, 1987.
- [18] K A Chao, J Spalek und A M Oles. Kinetic exchange interaction in a narrow S-band. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 10(10):L271, 1977.
- [19] A. L. Chernyshev, D. Galanakis, P. Phillips, A. V. Rozhkov und A.-M. S. Tremblay. Higher order corrections to effective low-energy theories for strongly correlated electron systems. *Phys. Rev. B*, 70:235111, Dec 2004.
- [20] C. B. Chiu, E. C. G. Sudarshan und B. Misra. Time evolution of unstable quantum states and a resolution of Zeno’s paradox. *Phys. Rev. D*, 16:520–529, Jul 1977.
- [21] Piers Coleman. *Heavy Fermions: Electrons at the Edge of Magnetism*. John Wiley & Sons, Ltd, 2007.
- [22] P. G. de Gennes. Effects of Double Exchange in Magnetic Crystals. *Phys. Rev.*, 118(1):141–154, Apr 1960.
- [23] Rafael de la Madrid. The resonance amplitude associated with the Gamow states. *Nuclear Physics A*, 812:13 – 27, 2008.
- [24] Rafael de la Madrid. Replacing the Breit-Wigner Amplitude by the Complex Delta Function to Describe Resonances. *Progress of Theoretical Physics Supplement*, 184:516–522, 2010.
- [25] P. A. M. Dirac. The Quantum Theory of the Electron. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A*, 117(778):610–624, 1928.
- [26] P.G.J. Dongen, F. Gebhard und D. Vollhardt. Variational evaluation of correlation functions for lattice electrons in high dimensions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 76:199–210, 1989.
- [27] E.N. Economou. *Green’s functions in quantum physics*. Springer series in solid-state sciences. Springer, 2006.
- [28] R. J. Elliott, J. A. Krumhansl und P. L. Leath. The theory and properties of randomly disordered crystals and related physical systems. *Rev. Mod. Phys.*, 46(3):465–543, Jul 1974.
- [29] P. Fazekas, B. Menge und E. Müller-Hartmann. Ground state phase diagram of the infinite dimensional Hubbard model: A variational study. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 78:69–80, 1990.
- [30] K. O. Friedrichs. On the perturbation of continuous spectra. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 1(4):361–406, 1948.

- [31] Matteo Frigo, Steven und G. Johnson. The design and implementation of FFTW3. In *Proceedings of the IEEE*, pages 216–231, 2005.
- [32] Sebastian Fuchs, Emanuel Gull, Matthias Troyer, Mark Jarrell und Thomas Pruschke. Spectral properties of the three-dimensional Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 83:235113, Jun 2011.
- [33] G. Gamow. Zur Quantentheorie des Atomkernes. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 51:204–212, 1928.
- [34] W. Gasser, E. Heiner, K. Elk und J. Wiley. *Greensche Funktionen in Festkörper-und Vielteilchenphysik*. Wiley Online Library, 2001.
- [35] A. Gelfert und W. Nolting. Absence of a Magnetic Phase Transition in Heisenberg, Hubbard, and Kondo-Lattice (s-f) Films. *physica status solidi (b)*, 217(2):805–818, 2000.
- [36] Axel Gelfert und Wolfgang Nolting. The absence of finite-temperature phase transitions in low-dimensional many-body models: a survey and new results. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(27):R505, 2001.
- [37] Antoine Georges und Gabriel Kotliar. Hubbard model in infinite dimensions. *Phys. Rev. B*, 45:6479–6483, Mar 1992.
- [38] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth und Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 68:13–125, Jan 1996.
- [39] Dipan K. Ghosh. Nonexistence of Magnetic Ordering in the One- and Two-Dimensional Hubbard Model. *Phys. Rev. Lett.*, 27:1584–1587, Dec 1971.
- [40] V Glaser und G Källen. A model of an unstable particle. *Nuclear Physics*, 2(6):706 – 722, 1956.
- [41] W. Greiner. *Quantenmechanik: Einführung*. Theoretische Physik. Harry Deutsch Verlag, 2005.
- [42] Emanuel Gull, Andrew J. Millis, Alexander I. Lichtenstein, Alexey N. Rubtsov, Matthias Troyer und Philipp Werner. Continuous-time Monte Carlo methods for quantum impurity models. *Rev. Mod. Phys.*, 83:349–404, May 2011.
- [43] F. Günther, G. Seibold und J. Lorenzana. Stability of ferromagnetism within the time-dependent Gutzwiller approximation for the Hubbard model. *physica status solidi (b)*, 248(2):339–351, 2011.
- [44] M. C. Gutzwiller. Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals. *Phys. Rev. Lett.*, 10(5):159–162, Mar 1963.
- [45] Thoralf Hanisch, Götz S. Uhrig und Erwin Müller-Hartmann. Lattice dependence of saturated ferromagnetism in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 56: 13960–13982, Dec 1997.

- [46] A. Brooks Harris und Robert V. Lange. Single-Particle Excitations in Narrow Energy Bands. *Phys. Rev.*, 157:295–314, May 1967.
- [47] W. Heisenberg. Zur Theorie des Ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 49: 619–636, 1928.
- [48] K. Held und D. Vollhardt. Electronic Correlations in Manganites. *Phys. Rev. Lett.*, 84:5168–5171, May 2000.
- [49] John Hennig. Grundzustandsphasendiagramm des s-f-Modells. Diploma thesis, Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik, Humboldt Universität zu Berlin, 2005.
- [50] S. Henning und W. Nolting. Ground-state magnetic phase diagram of the ferromagnetic Kondo-lattice model. *Phys. Rev. B*, 79(6):064411, 2009.
- [51] S. Henning und W. Nolting. Ferromagnetism and nonlocal correlations in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 85:125114, Mar 2012.
- [52] S. Henning, F. Körmann, J. Kienert, W. Nolting und S. Schwieger. Green function theory versus quantum Monte Carlo calculations for thin magnetic films. *Phys. Rev. B*, 75:214401, Jun 2007.
- [53] S. Henning, P. Herrmann und W. Nolting. Exact results on the Kondo-lattice magnetic polaron. *Phys. Rev. B*, 86:085101, Aug 2012.
- [54] T. Herrmann und W. Nolting. Magnetism in the single-band Hubbard model. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 170(3):253 – 276, 1997.
- [55] T. Herrmann und W. Nolting. Ferromagnetism in the Hubbard model: Influence of the lattice structure. *Solid State Communications*, 103(6):351–356, 1997.
- [56] Tomas Herrmann. Korrelationseffekte in der elektronischen Struktur eines Modell-Bandmagneten. Diploma thesis, Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik, Humboldt Universität zu Berlin, 1996.
- [57] Alexander Cyril Hewson. Cambridge University Press, 1993.
- [58] T. Hickel, J. Roeseler und W. Nolting. Exact Solution of the Two-Site Correlated Kondo Lattice Model. *Act. Phys. Pol. B*, 34:1291, 2003.
- [59] J. E. Hirsch. Two-dimensional Hubbard model: Numerical simulation study. *Phys. Rev. B*, 31:4403–4419, Apr 1985.
- [60] G. Höhler. Über die Exponentialnäherung beim Teilchenzerfall. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 152:546–565, 1958.
- [61] Leon Van Hove. Energy corrections and persistent perturbation effects in continuous spectra. *Physica*, 21:901 – 923, 1955.
- [62] Leon Van Hove. The approach to equilibrium in quantum statistics: A perturbation treatment to general order. *Physica*, 23:441 – 480, 1957.

- [63] J. Hubbard. Electron Correlations in Narrow Energy Bands. *Proc. Roy. Soc. London. A*, 276(1365):238–257, Nov 1963.
- [64] Yu A Izumov und M V Medvedev. Magnetic polaron in a ferromagnetic crystal. *Sov. Phys. JETP*, 32:302, 1971.
- [65] Takeo Izuyama, Duk-Joo Kim und Ryogo Kubo. Band Theoretical Interpretation of Neutron Diffraction Phenomena in Ferromagnetic Metals. *Journal of the Physical Society of Japan*, 18(7):1025–1042, 1963.
- [66] G S Joyce und R T Delves. Exact product forms for the simple cubic lattice Green function II. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 37(20):5417, 2004.
- [67] T. Jungwirth, K. Y. Wang, J. Mašek, K. W. Edmonds, Jürgen König, Jairo Sinova, M. Polini, N. A. Goncharuk, A. H. MacDonald, M. Sawicki, A. W. Rushforth, R. P. Campion, L. X. Zhao, C. T. Foxon und B. L. Gallagher. Prospects for high temperature ferromagnetism in (Ga,Mn)As semiconductors. *Phys. Rev. B*, 72:165204, Oct 2005.
- [68] T. Jungwirth, Jairo Sinova, J. Mašek, J. Kučera und A. H. MacDonald. Theory of ferromagnetic (iii,mn)v semiconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 78:809–864, Aug 2006.
- [69] Henrik Kajueter und Gabriel Kotliar. New Iterative Perturbation Scheme for Lattice Models with Arbitrary Filling. *Phys. Rev. Lett.*, 77:131–134, Jul 1996.
- [70] Y. Kakehashi und P. Fulde. Self-consistent projection operator approach to nonlocal excitation spectra. *Phys. Rev. B*, 70:195102, Nov 2004.
- [71] Junjiro Kanamori. Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals. *Progress of Theoretical Physics*, 30(3):275–289, 1963.
- [72] C Karrasch, R Hedden, R Peters, Th Pruschke, K Schönhammer und V Meden. A finite-frequency functional renormalization group approach to the single impurity Anderson model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(34):345205, 2008.
- [73] C. Karrasch, V. Meden und K. Schönhammer. Finite-temperature linear conductance from the Matsubara Green’s function without analytic continuation to the real axis. *Phys. Rev. B*, 82:125114, Sep 2010.
- [74] Tadao Kasuya. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener’s Model. *Progress of Theoretical Physics*, 16(1):45–57, 1956.
- [75] S. A. Khalfin. Contribution to the Decay Theory of a Quasi-Stationary State. *Sov. Phys. JETP*, 6:1053, 1958.
- [76] J. Kienert, S. Schwieger, K. Lenz, J. Lindner, K. Baberschke und W. Nolting. Mechanism of temperature dependence of the magnetic anisotropy energy in ultrathin Cobalt and Nickel films. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 316(2):e86 – e89, 2007.

- [77] Winfried Koller, Alexander Prüll, Hans Gerd Evertz und Wolfgang von der Linden. Uniform hopping approach to the ferromagnetic Kondo model at finite temperature. *Phys. Rev. B*, 67(10):104432, Mar 2003.
- [78] F. Körmann, J. Kienert, S. Schwieger und W. Nolting. Cu cap layer on Ni8/Cu(001): reorientation and TC-shift. *The European Physical Journal B*, 65:499–504, 2008.
- [79] T. D. Lee. Some Special Examples in Renormalizable Field Theory. *Phys. Rev.*, 95:1329–1334, Sep 1954.
- [80] Ven-Chung Lee und L. Liu. Exchange mechanism in europium compounds. *Phys. Rev. B*, 30:2026–2035, Aug 1984.
- [81] Jean-Marc Levy-Leblond. Nonrelativistic particles and wave equations. *Communications in Mathematical Physics*, 6:286–311, 1967.
- [82] Ken Lichtner. Thermodynamik und Transporteigenschaften im Hubbard-Modell. Diploma thesis, Lehrstuhl für Theoretische Festkörperphysik, Humboldt Universität zu Berlin, 2009.
- [83] B. A. Lippmann und Julian Schwinger. Variational Principles for Scattering Processes. I. *Phys. Rev.*, 79:469–480, Aug 1950.
- [84] J. M. Luttinger und J. C. Ward. Ground-State Energy of a Many-Fermion System. II. *Phys. Rev.*, 118:1417–1427, Jun 1960.
- [85] A. H. MacDonald, S. M. Girvin und D. Yoshioka. $\frac{t}{U}$ expansion for the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 37:9753–9756, Jun 1988.
- [86] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke und Matthias H. Hettler. Quantum cluster theories. *Rev. Mod. Phys.*, 77(3):1027–1080, Oct 2005.
- [87] N. D. Mermin und H. Wagner. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Phys. Rev. Lett.*, 17:1133–1136, Nov 1966.
- [88] S Methfessel und D C Mattis. Magnetic Semiconductors. In S Flügge, editor, *Handb. Phys.*, volume XVIII/1, page 389. Springer, 1968.
- [89] Walter Metzner und Dieter Vollhardt. Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 62:324–327, Jan 1989.
- [90] D Meyer, C Santos und W Nolting. Quantum effects in the quasiparticle structure of the ferromagnetic Kondo lattice model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13(11):2531, 2001.
- [91] B. Misra und E. C. G. Sudarshan. The zeno’s paradox in quantum theory. *Journal of Mathematical Physics*, 18(4):756–763, 1977.
- [92] Tohru Morita und Tsuyoshi Horiguchi. Lattice Green’s Functions for the Cubic Lattices in Terms of the Complete Elliptic Integral. *Journal of Mathematical Physics*, 12(6):981–986, 1971.

- [93] E. Müller-Hartmann. Correlated fermions on a lattice in high dimensions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 74:507–512, 1989.
- [94] E. Müller-Hartmann. The Hubbard model at high dimensions: some exact results and weak coupling theory. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 76:211–217, 1989.
- [95] Yosuke Nagaoka. Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band. *Phys. Rev.*, 147:392–405, Jul 1966.
- [96] Noboru Nakanishi. A Theory of Clothed Unstable Particles. *Progress of Theoretical Physics*, 19(6):607–621, 1958.
- [97] H. E. Nigh, S. Legvold und F. H. Spedding. Magnetization and Electrical Resistivity of Gadolinium Single Crystals. *Phys. Rev.*, 132:1092–1097, Nov 1963.
- [98] W. Nolting. Theory of ferromagnetic semiconductors. *physica status solidi (b)*, 96(1):11–54, 1979.
- [99] W Nolting. Rigorous results for electronic excitation spectrum of a ferromagnetic semiconductor. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 12(15):3033, 1979.
- [100] W Nolting. *Fundamentals of Many-body Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [101] W. Nolting. *Grundkurs Theoretische Physik 7: Viel-Teilchen-Theorie*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2009.
- [102] W. Nolting und W. Borgiel. Band magnetism in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 39:6962–6978, Apr 1989.
- [103] W. Nolting und A. Ramakanth. *Quantum Theory of Magnetism*. Springer Berlin Heidelberg, 2009.
- [104] W. Nolting, G. Borstel und W. Borgiel. Dynamical corrections to density-functional theory for quasiparticles in ferromagnetic $4f$ systems. I. $T=0$ results for EuO. *Phys. Rev. B*, 35:7015–7024, May 1987.
- [105] W. Nolting, S. Rex und S. Mathi Jaya. Magnetism and electronic structure of a local moment ferromagnet. *J. Phys.: Condens. Matter*, 9:1301, 1997.
- [106] Thomas Obermeier, Thomas Pruschke und Joachim Keller. Ferromagnetism in the large- U Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 56:R8479–R8482, Oct 1997.
- [107] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto und Y. Iye. (Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs. *Applied Physics Letters*, 69(3):363–365, 1996.
- [108] Taisuke Ozaki. Continued fraction representation of the Fermi-Dirac function for large-scale electronic structure calculations. *Phys. Rev. B*, 75:035123, Jan 2007.

- [109] Hyowon Park, K. Haule, C. A. Marianetti und G. Kotliar. Dynamical mean-field theory study of Nagaoka ferromagnetism. *Phys. Rev. B*, 77:035107, Jan 2008.
- [110] Guido Parravicini, Vittorio Gorini und E. C. G. Sudarshan. Resonances, scattering theory, and rigged Hilbert spaces. *Journal of Mathematical Physics*, 21(8):2208–2226, 1980.
- [111] R Peters und T Pruschke. Magnetic phase diagram of the Hubbard model with next-nearest-neighbour hopping. *New Journal of Physics*, 11(8):083022, 2009.
- [112] M. G. Pini, P. Politi und R. L. Stamps. Anisotropy effects on the magnetic excitations of a ferromagnetic monolayer below and above the Curie temperature. *Phys. Rev. B*, 72:014454, Jul 2005.
- [113] M. Potthoff, T. Wegner und W. Nolting. Interpolating self-energy of the infinite-dimensional Hubbard model: Modifying the iterative perturbation theory. *Phys. Rev. B*, 55:16132–16142, Jun 1997.
- [114] M. Potthoff, T. Herrmann, T. Wegner und W. Nolting. The Moment Sum Rule and Its Consequences for Ferromagnetism in the Hubbard Model. *physica status solidi (b)*, 210(1):199–228, 1998.
- [115] Th. Pruschke, D. L. Cox und M. Jarrell. Hubbard model at infinite dimensions: Thermodynamic and transport properties. *Phys. Rev. B*, 47:3553–3565, Feb 1993.
- [116] P Richmond. An electron in a ferromagnetic crystal (the magnetic polaron). *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 3(12):2402, 1970.
- [117] Laura M. Roth. Electron Correlation in Narrow Energy Bands. I. The Two-Pole Approximation in a Narrow S Band. *Phys. Rev.*, 184:451–459, Aug 1969.
- [118] A. N. Rubtsov, M. I. Katsnelson und A. I. Lichtenstein. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 77:033101, Jan 2008.
- [119] M. A. Ruderman und C. Kittel. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons. *Phys. Rev.*, 96:99–102, Oct 1954.
- [120] M. V. Sadovskii, I. A. Nekrasov, E. Z. Kuchinskii, Th. Pruschke und V. I. Anisimov. Pseudogaps in strongly correlated metals: A generalized dynamical mean-field theory approach. *Phys. Rev. B*, 72:155105, Oct 2005.
- [121] Myron B. Salamon und Marcelo Jaime. The physics of manganites: Structure and transport. *Rev. Mod. Phys.*, 73:583–628, Aug 2001.
- [122] N. Sandschneider und W. Nolting. Microscopic model for current-induced switching of magnetization for half-metallic leads. *Phys. Rev. B*, 79:184423, May 2009.

- [123] Anders W. Sandvik. Stochastic series expansion method with operator-loop update. *Phys. Rev. B*, 59:R14157–R14160, Jun 1999.
- [124] C. Santos und W. Nolting. Ferromagnetism in the Kondo-lattice model. *Phys. Rev. B*, 65(14):144419, Mar 2002.
- [125] C Santos, V Eyert und W Nolting. Ferromagnetism and temperature-dependent electronic structure of HCP gadolinium. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 272–276, Supplement(0):E371 – E372, 2004.
- [126] C. Santos, W. Nolting und V. Eyert. Ferromagnetism and temperature-dependent electronic structure of hcp gadolinium. *Phys. Rev. B*, 69:214412, Jun 2004.
- [127] F. Scheck. *Theoretische Physik: Nichtrelativistische Quantentheorie Vom Wasserstoffatom Zu Den Vielteilchensystemen*, volume 2. Springer Verlag, 2005.
- [128] G. Schliecker. *Spektrale Eigenschaften des Hubbardmodells in niedrigen Dimensionen*. PhD thesis, Freie Universität Berlin, 1994.
- [129] Sebastian Schmitt, Norbert Grewe und Torben Jabben. Itinerant and local-moment magnetism in strongly correlated electron systems. *Phys. Rev. B*, 85: 024404, Jan 2012.
- [130] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group. *Rev. Mod. Phys.*, 77:259–315, Apr 2005.
- [131] H. Schweitzer und G. Czycholl. Second order U-perturbation approach to the Anderson lattice model in high dimensions. *Solid State Communications*, 69 (2):171 – 176, 1989.
- [132] H. Schweitzer und G. Czycholl. Weak-coupling treatment of the Hubbard model in one, two and three dimensions. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 83:93–103, 1991.
- [133] S. Schwieger, J. Kienert und W. Nolting. Theory of field-induced spin reorientation transition in thin Heisenberg films. *Phys. Rev. B*, 71:024428, Jan 2005.
- [134] S. Schwieger, J. Kienert, K. Lenz, J. Lindner, K. Baberschke und W. Nolting. Spin-Wave Excitations: The Main Source of the Temperature Dependence of Interlayer Exchange Coupling in Nanostructures. *Phys. Rev. Lett.*, 98:057205, Jan 2007.
- [135] P. Schwob. Die magnetischen Eigenschaften der Europium-Chalkogenide unter hydrostatischem Druck. *Physik der kondensierten Materie*, 10(2):186–218, 1969.
- [136] B. Sriram Shastry und D. C. Mattis. Theory of the magnetic polaron. *Phys. Rev. B*, 24:5340–5348, Nov 1981.

- [137] Manfred Sigrist, Hirokazu Tsunetsugu und Kazuo Ueda. Rigorous results for the one-electron Kondo-lattice model. *Phys. Rev. Lett.*, 67:2211–2214, Oct 1991.
- [138] M. Stier und W. Nolting. Extensions to the Kondo lattice model to achieve realistic Curie temperatures and appropriate behavior of the resistivity for manganites. *Phys. Rev. B*, 75:144409, Apr 2007.
- [139] M. Stier und W. Nolting. Magnetic phase diagrams of manganite-like local-moment systems with Jahn-Teller distortions. *Phys. Rev. B*, 78:144425, Oct 2008.
- [140] M Stier, S Henning und W Nolting. The ground state phase diagram of the diluted ferromagnetic Kondo-lattice model. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(27):276006, 2011.
- [141] Martin Stier. *Magnetische Phasen in korrelierten Systemen lokaler Momente*. PhD thesis, 2011.
- [142] E. C. G. Sudarshan und Charles B. Chiu. Analytic continuation of quantum systems and their temporal evolution. *Phys. Rev. D*, 47:2602–2614, Mar 1993.
- [143] E. C. G. Sudarshan, C. B. Chiu und Vittorio Gorini. Decaying states as complex energy eigenvectors in generalized quantum mechanics. *Phys. Rev. D*, 18:2914–2929, Oct 1978.
- [144] E. C. G. Sudarshan, Charles B. Chiu und G. Bhamathi. *Unstable Systems in Generalized Quantum Theory*, pages 121–210. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [145] A. Toschi, A. A. Katanin und K. Held. Dynamical vertex approximation: A step beyond dynamical mean-field theory. *Phys. Rev. B*, 75:045118, Jan 2007.
- [146] G. E. Uhlenbeck und S. Goudsmit. Ersetzung der Hypothese vom unmechanischen Zwang durch eine Forderung bezüglich des inneren Verhaltens jedes einzelnen Elektrons. *Die Naturwissenschaften*, 13:953–954, 1925.
- [147] G. E. Uhlenbeck und S. Goudsmit. Spinning Electrons and the Structure of Spectra. *Nature*, 117:264–265, 1926.
- [148] M. Ulmke. Ferromagnetism in the Hubbard model on fcc-type lattices. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 1: 301–304, 1998.
- [149] Jeroen van den Brink und Daniel Khomskii. Double Exchange via Degenerate Orbitals. *Phys. Rev. Lett.*, 82(5):1016–1019, Feb 1999.
- [150] Y. M. Vilk. Shadow features and shadow bands in the paramagnetic state of cuprate superconductors. *Phys. Rev. B*, 55:3870–3875, Feb 1997.
- [151] A. Virosztek und J. Ruvalds. Nested-Fermi-liquid theory. *Phys. Rev. B*, 42: 4064–4072, Sep 1990.

- [152] D. Vollhardt, N. Blümer, K. Held, M. Kollar, J. Schlipf, M. Ulmke und J. Wahle. Metallic ferromagnetism: Progress in our understanding of an old strong-coupling problem. In Bernhard Kramer, editor, *Advances in Solid State Physics 38*, volume 38 of *Advances in Solid State Physics*, pages 383–396. Springer Berlin Heidelberg, 1999.
- [153] P. Wachter. Chapter 19 Europium chalcogenides: EuO, EuS, EuSe and EuTe. In Jr. Karl A. Gschneidner und LeRoy Eyring, editors, *Alloys and Intermetallics*, volume 2 of *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, pages 507 – 574. Elsevier, 1979.
- [154] M. B. Walker und Th. W. Ruijgrok. Absence of Magnetic Ordering in One and Two Dimensions in a Many-Band Model for Interacting Electrons in a Metal. *Phys. Rev.*, 171:513–515, Jul 1968.
- [155] C. Weber, A. Amaricci, M. Capone und P. B. Littlewood. Augmented hybrid exact-diagonalization solver for dynamical mean field theory. *Phys. Rev. B*, 86:115136, Sep 2012.
- [156] T. Wegner, M. Potthoff und W. Nolting. Temperature-dependent electronic structure and ferromagnetism in the $d = \infty$ Hubbard model studied by a modified perturbation theory. *Phys. Rev. B*, 57:6211–6214, Mar 1998.
- [157] P. Weiss. Molekulares Feld und Ferromagnetismus. *Phys. ZS.*, 9:358–367, 1908.
- [158] Philipp Werner und Andrew J. Millis. Hybridization expansion impurity solver: General formulation and application to Kondo lattice and two-orbital models. *Phys. Rev. B*, 74:155107, Oct 2006.
- [159] Philipp Werner, Armin Comanac, Luca de’ Medici, Matthias Troyer und Andrew J. Millis. Continuous-Time Solver for Quantum Impurity Models. *Phys. Rev. Lett.*, 97:076405, Aug 2006.
- [160] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69:2863–2866, Nov 1992.
- [161] P. A. Wolff. Localized Moments in Metals. *Phys. Rev.*, 124:1030–1035, Nov 1961.
- [162] Ulli Wolff. Saddle point mean field calculation in the Hubbard model. *Nuclear Physics B*, 225(3):391 – 408, 1983.
- [163] Kei Yosida. Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys. *Phys. Rev.*, 106:893–898, Jun 1957.
- [164] R. Zitzler, Th. Pruschke und R. Bulla. Magnetism and phase separation in the ground state of the Hubbard model. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 27:473–481, 2002.